UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS
FACULTAD DE CIENCIAS PURAS Y NATURALES

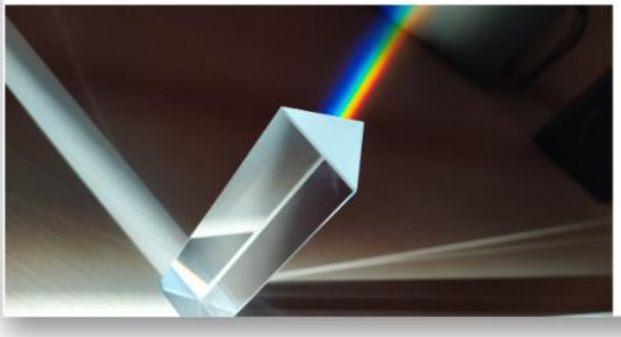
Memorias Científicas del

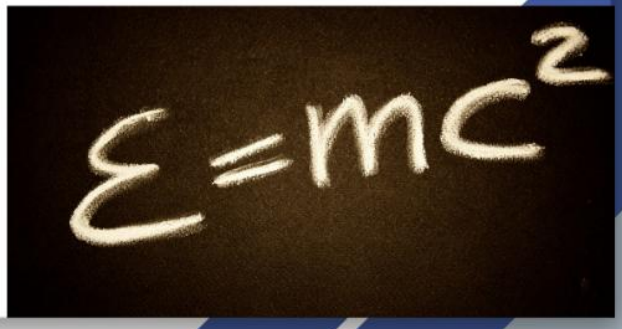
I CONGRESO INTERNACIONAL

De Ciencias Puras y Naturales (CI-FCPN)

19, 20 Y 21 de mayo del 2026







Área de Física

LA PAZ – BOLIVIA
2026

UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS
FACULTAD DE CIENCIAS PURAS Y NATURALES
MEMORIAS CIENTÍFICAS DEL I CONGRESO INTERNACIONAL DE CIENCIAS PURAS Y NATURALES (CI-FCPN)
- ÁREA DE FÍSICA -

REGISTRO:

ISBN: 978-9917-0-7793-0

DEPOSITO LEGAL: 4-4-35-2026-PO

DIRECCIÓN: AV. VILLAZÓN NO. 1995, MONOBLOCK CENTRAL DE LA UMSA – EDIF. ANTIGUO

EDICIÓN: PRIMERA

EQUIPO TÉCNICO:

DIAGRAMACIÓN:

- M.SC. AUGUSTO CESAR LUNASCO CUSI
- M.SC. WILSON FELIPE ALARCON QUISPE
- UNIV. EFRAIN HUGO CHIPANA TITO
- UNIV. JOSE ANDRES ARUQUIPA COCA
- UNIV. ALEJANDRA BELEN HUANCA CAZAS

DISEÑO DE CUBIERTA: UNIV. ALEJANDRA BELEN HUANCA CAZAS

TODOS LOS DERECHOS RESERVADOS.

ESTÁ PROHIBIDA CUALQUIER REPRODUCCIÓN Y/O DIFUSIÓN TOTAL O PARCIAL DE ESTE LIBRO, EN CUALQUIER FORMA, POR MEDIOS MECÁNICOS, ELECTRÓNICOS, INCLUSIVE POR FOTOCOPIAS GRABACIÓN MAGNETOFÓNICA Y CUALQUIER SISTEMA DE ALMACENAMIENTO DE INFORMACIÓN. PENADO POR LA LEY DE ACUERDO A DISPOSICIONES EN VIGENCIA (DERECHOS DE AUTOR, LEY NRO. 1322 DEL 13 DE ABRIL DE 1992). SALVO CONSENTIMIENTO DEL AUTOR.

LA PAZ – BOLIVIA

UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS

PH.D. MARÍA EUGENIA GARCÍA MORENO
RECTORA

DR. TITO ESTÉVEZ MARTINI
VICERRECTOR

FACULTAD DE CIENCIAS PURAS Y NATURALES

M.SC. ALDO RAMIRO VALDEZ ALVARADO
DECANO

PH.D. ADRIANA MIRIAM MALLEA MORALES
VICEDECANA

COMITÉ CIENTÍFICO (CI – FCPN)

PH.D. ADRIANA MIRIAM MALLEA MORALES	COORDINACIÓN GENERAL
DR. PORFIRIO SUÑAGUA SALGADO	PRESIDENTE DEL COMITÉ CIENTÍFICO – CARRERA DE MATEMÁTICA
M.SC. WINDER ANDRES CANEZO GOMEZ	CARRERA DE BIOLOGÍA
LIC. RAQUEL CHAMA RODRIGUEZ	CARRERA DE CIENCIAS QUÍMICAS
PH.D. EVARISTO MAMANI CARLO	CARRERA DE FÍSICA
PH.D. REYNALDO JAVIER ZEBALLOS DAZA	CARRERA DE INFORMÁTICA
PH.D. MOISES MARTIN SILVA CHOQUE	CARRERA DE INFORMÁTICA
M.SC. FERNANDO ODAY RIVERO SUGUIURA	CARRERA DE ESTADÍSTICA
M.SC. AUGUSTO CESAR LUNASCO CUSI	UNIDAD FACULTATIVA DE FOMENTO A LA INVESTIGACIÓN - UFFI
M.SC. WILSON FELIPE ALARCON QUISPE	UNIDAD DE GESTIÓN E INNOVACIÓN DEL DESARROLLO ACADÉMICO - UGIDA

INDICE

Presentación 1

CONFERENCIAS MAGISTRALES Y PLENARIAS 3

EXPLORANDO LAS CORRIENTES ESTELARES Y LAS GALAXIAS SATÉLITES ALREDEDOR DE LA GALAXIA GIGANTE DE BAJO BRILLO SUPERFICIAL MALIN 1 4

(Plenaria) 4

ROY BUSTOS ESPINOZA 4

QSO SPECTRAL COMPOSITION AND MEAN SPECTRUM OF QUASARS IN SDSS 72

(Plenaria) 72

M.Sc. EVANZ LAZARO 72

APROVECHAMIENTO ENERGÉTICO CON MICRO HIDROENERGÍA EN RÍO YATA: UNA ALTERNATIVA PARA EL DESARROLLO SOSTENIBLE DE COMUNIDADES RURALES AISLADAS 90

(Plenaria) 90

PASCUAL MALDONADO LOPEZ 90

IMPLEMENTACIÓN DE REACTORES NUCLEARES MODULARES PEQUEÑOS EN BOLIVIA Y SU IMPACTO AL SECTOR ENERGÉTICO 131

(Plenaria) 131

M.Sc. BENIGNO MAMANI CUENCA 131

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES BIDIMENSIONALES PARA LA TRANSICIÓN ENERGÉTICA: ESTRATEGIAS EN EL ALMACENAMIENTO DE H_2 Y CAPTURA DE CO_2 139

(Plenaria) 139

M.Sc. WILLAMS RODRIGO QUISPE URURE 139

ENTROPÍAS DE RÉNYI ESTABILIZADORAS, MAGIA CUÁNTICA Y UNIVERSALIDAD EN CADENAS CUÁNTICAS DE ESPÍN 246

(Plenaria) 246

M.Sc. EDDY ARIEL RAMIREZ TRINO 246

COMUNICACIONES CIENTÍFICAS 260

EFECTOS DE RADIACIÓN POR NEUTRONES EN MATERIALES EN UN REACTOR NUCLEAR DE INVESTIGACIÓN 261

(Comunicación) 261

WILMER APAZA CONDORI 261

DOSIMETRÍA PERSONAL EN INSTALACIONES DE REACTORES DE INVESTIGACIÓN: CASO DEL RB-01 273

(Comunicación) 273

M.Sc. Ing. SARA FERNANDEZ CALLE 273

ESTABILIDAD TERMODINÁMICA Y DINÁMICA DE CÁSCARAS DELGADAS DE EINSTEIN-MAXWELL Y DE EINSTEIN-BORN-INFELD EXTREMALES EN (2+1) DIMENSIONES. 283

(Comunicación) 283

Lic. DARIO ALBERTO OLMOS CAYO 283

PROPUESTA TÉCNICA DE CAPA DE AGUA CALIENTE PARA PROTECCIÓN RADIOLÓGICA EN REACTORES DE INVESTIGACIÓN TIPO PISCINA 302

(Comunicación) 302

Ing. HENRRY MAURICIO SUAREZ VARGAS 302

ENVENENAMIENTO POR XENÓN-135 Y SAMARIO-149 EN EL REACTOR NUCLEAR DE INVESTIGACIÓN BOLIVIANO RB-01 (PREDICCIONES PRE-OPERACIONALES) 336

(Comunicación) 336

M.Sc. JUAN FRANCISCO VALDEZ RODRIGUEZ 336

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO EN TECNOLOGÍA NUCLEAR DE BOLIVIA: FASES DE CONSTRUCCIÓN Y PUESTA EN MARCHA DEL REACTOR DE INVESTIGACIÓN 352

(Comunicación)..... 352

M.Sc. ERLAN VASQUEZ VELASQUEZ 352

Presentación

Con gran satisfacción presentamos las Memorias Científicas del I Congreso Internacional de Ciencias Puras y Naturales (CI-FCPN), publicación que reúne y preserva una selección de los trabajos de investigación presentados durante las jornadas académicas desarrolladas los días 19, 20 y 21 de mayo, en el marco de este importante encuentro científico organizado por la Facultad de Ciencias Puras y Naturales de la Universidad Mayor de San Andrés (FCPN–UMSA).

El I Congreso Internacional de Ciencias Puras y Naturales (CI-FCPN) se constituyó en un espacio de encuentro, intercambio y difusión del conocimiento científico, congregando a investigadores, docentes, profesionales y estudiantes en torno a las principales problemáticas, avances y perspectivas de las ciencias puras, la tecnología y la innovación, su desarrollo permitió fortalecer el diálogo académico y científico, generando un escenario propicio para la presentación de resultados de investigación y el establecimiento de vínculos entre diferentes comunidades académicas.

Las presentes memorias constituyen un registro documental de la producción científica presentada durante el Congreso, organizada en las áreas de Biología, Estadística, Física, Informática, Matemáticas y Química, cada una de estas áreas representa un componente fundamental del quehacer científico de la Facultad y, al mismo tiempo, refleja la diversidad de enfoques, metodologías, problemas de investigación y resultados que caracterizan a las ciencias puras y sus aplicaciones.

La recopilación de estos trabajos tiene como propósito fundamental preservar, sistematizar y difundir el conocimiento científico generado y socializado durante el evento, proporcionando a investigadores, docentes, estudiantes y demás miembros de la comunidad académica una fuente de consulta que permita conocer las investigaciones presentadas y favorecer su posterior análisis, discusión y aprovechamiento académico.

La publicación de estas memorias adquiere, además, especial relevancia como instrumento de memoria institucional, puesto que documenta una experiencia académica y científica que contribuye al fortalecimiento de la investigación y la innovación en la Facultad de Ciencias Puras y Naturales, en este sentido, la memoria trasciende la función de recopilar trabajos científicos y se constituye en un testimonio del compromiso institucional con la generación, difusión y transferencia del conocimiento.

El desarrollo del Congreso fue posible gracias a la participación y colaboración de investigadores, docentes, estudiantes, autoridades universitarias, personal administrativo y equipos de apoyo, cuyo esfuerzo conjunto permitió llevar adelante las actividades académicas y científicas programadas, a todos ellos expresamos nuestro reconocimiento por su contribución al fortalecimiento de este espacio de intercambio científico.

De manera particular, esta publicación representa una oportunidad para visibilizar el trabajo de los investigadores y jóvenes científicos, reconociendo el valor de sus aportes y promoviendo una cultura académica orientada hacia la investigación, la innovación, la colaboración interdisciplinaria y la comunicación científica.

Asimismo, estas memorias constituyen una base para proyectar futuras iniciativas académicas y científicas, favoreciendo la continuidad de espacios de encuentro entre investigadores de diferentes disciplinas e instituciones, la generación y difusión sistemática de este tipo de productos contribuye a consolidar una comunidad científica activa y comprometida con los desafíos contemporáneos de la ciencia, la tecnología y la innovación.

Invitamos a la comunidad universitaria, científica y académica a consultar estas memorias como una expresión del trabajo investigativo desarrollado en las diferentes áreas de las Ciencias Puras y Naturales, esperamos que los trabajos aquí reunidos sirvan como fuente de referencia, inspiración y punto de partida para nuevas investigaciones, colaboraciones y propuestas que contribuyan al desarrollo científico y tecnológico de nuestra sociedad.

Finalmente, expresamos nuestro reconocimiento a todas las personas e instituciones que hicieron posible la realización del I Congreso Internacional de Ciencias Puras y Naturales (CI-FCPN) y la posterior consolidación de esta publicación, la presente memoria representa no solo el resultado de un encuentro científico, sino también el compromiso permanente de la Facultad de Ciencias Puras y Naturales con la excelencia académica, la investigación y la construcción colectiva del conocimiento.

COMITÉ ORGANIZADOR

CONFERENCIAS MAGISTRALES Y PLENARIAS

EXPLORANDO LAS CORRIENTES ESTELARES Y LAS GALAXIAS SATÉLITES ALREDEDOR DE LA GALAXIA GIGANTE DE BAJO BRILLO SUPERFICIAL MALIN 1

(Plenaria)

ROY BUSTOS ESPINOZA

rbustos@fcpn.edu.bo

Semblanza:

Web: http://fiumsa.edu.bo/rbustos/ Academic Formation Postgraduate in Astrophysics (PhD) at Astrophysics Institute, Pontificia Universidad Católica de Chile (PUC) (2021-2026), Santiago, Chile. Postgraduate in Physics (M. Sc.) at Physics Research Institute (IIF) - UMSA (2017), La Paz Diplomat in Physics Education, IIF – UMSA, (2001 - 2002), La Paz Bachelor's in Science (Lic.), Physics Department – UMSA (1997), La Paz Publications (44 = 7 + 33 + 4): Research Papers (7) / Outreach Papers (33) / Books (4) Professional Experience: Impeller of the Outreach projects: BOLIVIAN PHYSICS OLYMPIAD (OBF), BOLIVIAN OLYMPIAD ON ASTRONOMY AND ASTROPHYSICS (OBAA), DIPLOMATE IN PHYSICS FOR HIGH SCHOOL TEACHERS (DFÍS), First OLIMPIADA ANDINA DE ASTRONOMÍA Y ASTROFÍSICA, OAAA, 2009, Titikaka Lake, Bolivia, VI Iberoamerican Physics Olympiad, OIbF, 2001, Sorata, La Paz, Bolivia Professor of Physics Department with Research, Outreach activities: Researcher in Low Surface Brightness Galaxies, IA – PUC, Chile, 2023–202. Researcher in High Energy Gamma Rays - Astrophysics in Chacaltaya Mountain, UMSA, 1997-2010, 2019-2020. Researcher in Complex Systems: Synchronization of Oscillators & Chaos, IIF – UMSA, 2011-2018. Researcher in the Gravitational Three Body Problem, IIF – UMSA, La Paz, 2019-2020. Membership: Member of SOBOFI (Bolivian Physics Society), 1993 to the present, Bolivia. Member of LANENT

(Latin American Network for Education in Nuclear Technology) – International Atomic Energy Agency (IAEA), 2012 – 2018. Member of ABAC (Asociación Boliviana para el Avance de la Ciencia), 2008 to the present. Member of the Sociedad Chilena de Astronomía (SOCHIAS), 2023 – 2026. Member of the American Astronomical Society (AAS), 2023 – 2026

Introducción

Disney (1976) suggested the possibility that there are galaxies with a Surface Brightness (SB) lower than the empirical limit proposed by Freeman (1970), which defined the characteristic central surface brightness of disk galaxies around $21.65\ B$ mag arcsec^{-2}. This threshold was based on observations of High-Surface Brightness spirals and was initially thought to represent a universal feature of disk galaxies. Since then, the discovery rate of Low-Surface-Brightness Galaxies (LSBGs) has been boosted by advances in observational techniques and deeper sky surveys, leading to a growing recognition of their importance in galactic formation and evolution (Du et al. 2020).

In general terms, LSBGs exhibit a central surface brightness fainter than $23.5\ B$ mag arcsec^{-2} (Impey and Bothun 1997). These galaxies display poor star formation rates, low metallicity, and extended HI gas discs; characteristics shared with giant-LSBGs (gLSBGs), which appear as massive systems typically existing in isolation and having sizes larger than the size of the Milky Way (MW), to the 25th isophote (Das 2013).

Malin 1, one of the most iconic gLSBGs due to its immense size and faintness, was discovered serendipitously by Bothun et al. (1987). This particular gLSBG has a bar structure and shows a LINER nucleus (Barth 2007). The evidence indicates that the bar resulted from several star formation events along with the discovery of compact sources, pointing to a possible double nucleus system (Johnston et al. 2024). At its core (< 10 kpc), there is an ordinary High Surface Brightness Galaxy (HSBG), while the

periphery displays a LSB disk (Barth 2007). The final component features the most extensive known stellar disc and features with extraordinary detail, collecting data many hours in the r and g band, reaching a surface brightness of approximately 28.0 B mag arcsec^{-2} (Galaz et al. 2015; Boissier et al. 2016), and possesses an optical diameter near 240 kpc (Moore and Parker 2006). Ogle et al. (2016, 2019) report the discovery of a large sample of the most optically luminous, biggest, and massive spiral galaxies in the universe, called super spirals, which could be analogous to Malin 1; however, Malin 1 is still the largest stellar disk known (Ogle et al. 2016, 2019) but with a much lower star formation rate $\sim 1.2 M_{\odot} yr^{-1}$ (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010; Junais et al. 2024). The galaxy also possesses a large HI gas reservoir with a mass $4 - 7 \times 10^{10} M_{\odot}$ (Pickering et al. 1997; Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). It also has a high specific angular momentum (Di Teodoro et al. 2023; Boissier et al. 2016; Salinas and Galaz 2021), and an extended flat rotation curve (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010; Pickering et al. 1997), all of which suggest the presence of a vast dark mater halo (Mo 2010).

Malin 1 also presents HII regions, a radial decrease in the star formation rate's surface density, reduced metal content, and flattening in the outer disk (Junais et al. 2024). These characteristics provide clues about the development of the disc, with the most likely scenario involving the accretion of a preenriched gas from a previous merger (Junais et al. 2024; Zhu et al. 2018). Furthermore, the galaxy is characterized by a low dust content and a minimal presence of molecular gas (Gerritsen and De Blok 1999; Galaz et al. 2022, 2024; Junais et al. 2024).

Moreover, an optical map reveals a cavity in the southern part between the arms (Galaz et al. 2015). This cavity could be due to feedback from star formation, as the HI map shows a nearby asymmetric substructure (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010), or the action of supernova-driven winds expelling gas, similar to phenomena observed in other galaxies such as the Hoag galaxy (Bannikova 2018), the Fireworks galaxy (Blair et al.

2019), NGC 1300 (Maeda et al. 2022), or the gLSBG UGC1382 (Saburova and Cherepashchuk 2021). A northern warp in the HI disk shows nonaxisymmetry, possible due to the accretion of a paired system of two gas-rich satellite galaxies. This can be evidence of ongoing interaction (Saha et al. 2021).

Studies reveal that Malin 1 interacts with at least two companion galaxies, identified as Malin 1B and exo-Malin 1 (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010; Galaz et al. 2015). In addition, Malin 1A is part of the Malin 1 system and, together with Malin 1B, they are classified as compact ellipticals (cE) (Saburova and Cherepashchuk 2021). A recent study by Junais et al. (2024) identified several $H\alpha$ regions, including Malin 1C, which is part of the Malin 1 galaxy and possibly an ultra-diffuse galaxy (UDG) interacting with the core galaxy (Ji et al. 2021). Malin 1C has possibly been stripped of gas and outlying stars by tidal interactions (Kazantzidis S. et al. 2003).

Malin 1B and exo-Malin 1 are situated at distances of 14 kpc and 350 kpc, toward the southeast and northwest, respectively (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010). According to Saha et al. (2021), exo-Malin 1 may play a role in star formation within the central bar, while the accretion of Malin 1B could bolster star formation in the arms and bulge (Saha et al. 2021). As noted by Saburova et al. (2023) and Peñarrubia, Mcconnachie, and Babul (2006), extended discs in giant low surface brightness might develop through minor mergers involving gas-rich satellites, possibly applicable to exo-Malin 1, Malin 1B, Malin 1A, and Malin 1C.

Tidal stellar streams exemplify the continuous merging and accretion of galaxies, a key process in the formation of structure within the Universe (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012).

A large stellar stream located at the edge of the Coma galaxy cluster, beyond the Local Group, provides crucial insights into the gravitational potential of its surroundings (Román et al. 2023). Studying the brightness properties of the stream progenitors, it appears that they were accreted in relatively early epochs Vera-Casanova et al. (2022).

As Román et al. (2023) pointed out, such giant, faint stellar streams may exist in galaxy clusters and groups according to Λ-CDM. So, the presence of streams in the Malin 1 system could be the evidence that not all gLSBGs are isolated, in contrast to Das (2013), who argued that these giants are usually found isolated, often near the edges of voids, and that their lack of interactions contributes to their slow evolution.

Regarding other satellites and tidal streams, several well-studied examples highlight the remnants of disrupted dwarf galaxies. One such case is the Sagittarius tidal stream, which originates from the Sagittarius dwarf galaxy. Interestingly, some stream progenitors are unexpectedly distant from their associated tidal debris (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012), often separated by several to tens of degrees (Bonaca et al. 2021).
Another striking example is the extensive stellar stream discovered in the Coma cluster. This structure extends over 500 kpc in length and is also believed to have formed from the disruption of a dwarf galaxy (Román et al. 2023).

Furthermore, the position of a satellite along its orbit can determine whether it appears closer to, farther from, or in between its own tidal debris or stream components. As shown in studies of the Sagittarius stream, tidal tails do not always remain symmetrically distributed around their progenitor. Instead, their structure evolves due to orbital dynamics, where the leading and trailing arms undergo compression or stretching depending on their location along the orbit (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans

2012). At the apocenter, the debris tends to pile up, forming overdensities, while at the pericenter, the tidal arms stretch out as the material moves faster along the orbit.

Within Malin 1, possible streams labelled A and B have been found, possibly indicating historical interactions (Galaz et al. 2015). Stream B is significantly extended, reaching up to 200 kpc from the centre of Malin 1, and may serve as evidence of a historical interaction between exo-Malin 1 and Malin 1 (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010; Galaz et al. 2015). The relationship between the two streams remains unclear, as does the status of their progenitor galaxy: whether it is still intact or has been dismantled. Understanding the origins of these streams is crucial for deciphering the dynamics of the Malin 1 system. In particular, stream B contacts at least two arms of Malin 1, a detail clearly illustrated at the beginning of stream B that begins in the center of Malin 1 within label 3 in Fig. 1.

The possibility that stream A is concurrently connected with Malin 1B (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010) and/or Malin 1A (Saburova and Cherepashchuk 2021) supports the hypothesis of a past merger. Malin 1A and Malin 1B, both compact ellipticals (cE), could have experienced tidal stripping, potentially explaining their compact nature. If further stripping occurs, they might evolve into objects similar to Ultra-Compact Dwarfs (UCDs), as suggested by Bekki, Couch, and Drinkwater (2001). Meanwhile, Malin 1C's classification remains unclear: it could be either an ultra-diffuse Galaxy (UDG) (Ji et al. 2021) or a young star-forming region (Junais et al. 2024), possibly linked to past interactions.

Current orbital configurations significantly influence tidal stream arrangements, impacting both the leading and trailing arms, and possibly affecting the remnant bound core. This effect is substantiated by various simulation studies (see Fig. 1 in Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012). Consequently, Malin 1C and Malin 1A could play such roles. Alternatively, Malin 1B might be involved if streams A and B are connected.

Various hypotheses concerning the origin of gLSBG are detailed here. According to Noguchi (2001), gLSBGs evolve from standard spiral galaxies through dynamic changes over time. Their formation is influenced by environmental factors, including large galaxies in voids that feature conventional bulges coupled with extensive LSB disks (Hoffman, Silk, and Wyse 1992). Within the hierarchical formation paradigm, mergers between a central galaxy and its satellite companions may explain the considerable size observed (Peñarrubia, Mcconnachie, and Babul 2006). Although the origins and properties remain partially unknown, some cosmological simulations point to these alignment-driven mergers as the key to such large-scale development (Zhu et al. 2023). Moreover, Zhu et al. (2018) identified that a notable share of the cold gas at redshift zero emerged from cooling of a hot halo gas, a process initiated following the merger of two deeply interwoven galaxies.

The Λ-Cold Dark Matter (ΛCDM) cosmology theory suggests that the disintegration of satellite galaxies is a continuous process in the lifetime of massive galaxies (Martínez-Delgado et al. 2023; Miro-Carretero et al. 2024). The expansive size of the disk might result from the impact of two or more galaxies merging. This formation mechanism aligns with existing theories of galaxy formation (Zhu et al. 2018).

Research involving cosmological simulations (Zhu et al. 2018; Nelson et al. 2018; Pillepich et al. 2018) illustrates that smaller galaxies, often termed intruders, can interact with larger galaxies, leading to the formation of a giant Low-Surface Brightness galaxy (gLSBG) that shares notable similarities with Malin 1. Likewise, Mapelli et al. (2007) proposed that stimulated accretion might explain the exceptionally large disk size of Malin 1. Additionally, Zhu et al. (2018) indicated that a collision involving three galaxies could produce a gas-rich giant low-surface brightness galaxy.

This paper investigates Malin 1 and its surroundings. We analyze the orbital configurations of its satellite galaxies, including both leading and trailing segments, to comprehend their impact on its structure, kinematics, and evolutionary progression.

The structure of this article is as follows. Section 2 describes the observed substructures. Section 3 details the modelling approach for the Malin 1 system. Section 3.1 provides observational data and associated constraints. Section 3.2 discusses the gravitational potential of Malin 1, and Section 3.3 outlines scenarios to explore progenitor candidates of the stellar streams, including initial setups. Section 4 evaluates the results, and Section 5 discusses the physical implications of the findings. The conclusion is found in Section 6. Furthermore, two appendices summarize the optimal parameters and describe how prior knowledge is integrated into our model.

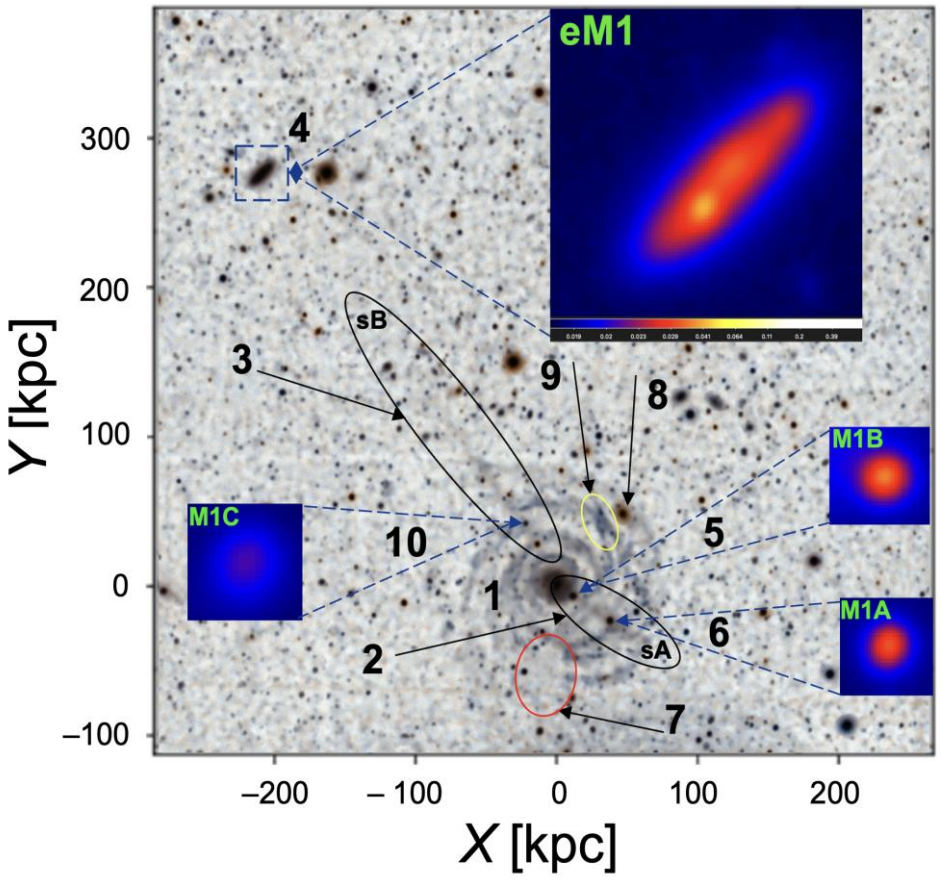
For our calculations, we used a flat ΛCDM cosmology with H_0 set at 70 km s^{-1} Mpc^{-1}, $\Omega_M = 0.27$, and $\Omega_\Lambda = 0.73$. This results in a projected angular scale of 1.557 kpc $arcsec^{-1}$ and a luminosity distance of 377 Mpc.

2. (Materials) Observed substructures in the Malin 1 system

This section offers a summary of the features identified in the optical image of Malin 1 (Galaz et al. 2015). The environment of Malin 1, observed in the g and r bands with the 6.5 m *Magellan/Clay* telescope, is shown in Fig. 1, and the listed substructures are indicated by arrows that follow the same numbering. The essential characteristics are listed in Table 1. Among the standout features of Malin 1, the following are noteworthy:

Figura 1: Optical view in g, and r band, of Malin 1 and their environment using Magellan/Clay telescope Galaz et al. (2015). In the figure we convert the original equatorial coordinates, using the projected angular scale of 1.557 kpc (Galaz et al. 2015), to X, Y in [kpc] units centered on the core of Malin 1. In the larger sub-panel (4), the color scale deploys arbitrary intensity units, and these units are consistent throughout all sub-

panels. Labels include: 1. Optical view, g, and r band, of Malin 1 Galaz et al. (2015). 2. Proposed stream A, possible linking Malin 1A, Malin 1B, and Malin 1. 3. Proposed stream B, presumably connecting Malin 1 to exo-Malin 1, and possibly Malin 1C (see point 10. in this caption). 4. The satellite galaxy SDSS J123708.91+142253.2 (Reshetnikov et al. 2010), referred to as exo-Malin 1, located at coordinates X = −211.38 kpc, 277.78 kpc. The approximate separation between exo-Malin 1 and Malin 1 is ∼ 350 kpc (Reshetnikov et al. 2010; Galaz et al. 2015). In their zoom-in image, there is a clear offset of the central SB peak from the geometrical centre, which could be result of external perturbations. 5. Malin 1B, a compact elliptical (cE) interacting galaxy (Saburova & Cherepashchuk 2021), accompanied by its amplified image. 6. Malin 1A, another cE interacting galaxy also examined by Saburova & Cherepashchuk (2021), along with its amplified image. 7. A proposed cavity highlighted with a red ellipse, which might be an area of decreased gas density. 8. A more distant galaxy in the backdrop (z=0.3639). 9. Yellow ellipse indicating clumps within the spiral arms; their structure suggests regions of star formation or clusters of newly formed stars, based on VLT-MUSE observations (Junais et al. 2024). 10. Considered a possible Ultra Diffuse Galaxy (UDG) (Ji et al. 2021), VLT-MUSE (Junais et al. 2024) identified this as a young star formation region with redshift z = 0.08292. It is situated at ∼ 46.75 kpc from Malin 1 center, forming part of the Malin 1 environment, and is referred to here as Malin 1C. An amplified image of Malin 1C is also available in colour to the left of Malin 1C



1. Malin 1: the giant Low Surface Brightness Galaxy (gLSBG). According to Barth (2007), it comprises a dual structure: a high surface brightness (HSB) spiral resembling an early-type galaxy with a radius under 10 kpc, which is set within a faint, extended, gas-rich outer region (gLSB) that extends approximately 100 – 120 kpc (Barth 2007; Moore and Parker 2006).
2. Stream A: As noted by Galaz et al. (2015), one possible stream, called Stream A (here denominated as sA), is highlighted by an elliptical outline and includes two galaxies: Malin 1B, positioned at ~ 14 kpc from the centre of Malin 1 (marked as point 5 in both the standard and magnified images), and Malin 1A at ~ 45 kpc from the same centre (marked as point 6).
3. Stream B: The largest ellipse shown in Fig. 1 outlines the possible Stream B (here denominated as sB), as noted by Galaz et al. (2015; Boissier et al. 2016). This stream might result from the removal of material (stars or gas) due to previous

interactions of sB with the satellite galaxy located at point 4 (discussed later). The gravitational interaction between these galaxies could lead to the stripping of material from this satellite candidate, forming the stream-like structure, sB.

4. exo-Malin 1: This is an associated satellite galaxy, identified in the Sloan Digital Sky Survey as SDSS J123708.91+142253.2. For brevity, it is referred to as exo-Malin 1, a designation initially introduced by Bustos-Espinoza et al. (2023). It has a total luminosity of $9.47 \times 10^9 L_{\odot}$, redshift $z = 0.083082$ which is close to Malin 1 redshift. It is at a projected distance of 350 kpc from Malin 1, and may have interacted with Malin 1 in the past (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010). This interaction could explain the formation of the extended low surface brightness (LSB) envelope or serve as a catalyst for the emergence of the suspected stream B (Galaz et al. 2015). Additionally, in the enhanced color image of exo-Malin 1, the centroid of light flux is misaligned with the geometric center, defined by the intersection of the major and minor axes of the ellipsoidal structure (not shown). This off-centre, found in this study, could indicate that exo-Malin 1 has experienced interactions, likely involving tidal forces with Malin 1. Further discussion on this can be found in the Section 5. Moreover, it is very intriguing that eM1 appears to be connected with stream B along an almost straight line towards the off-centre. This alignment could be produced by chance. However, this would be a natural result if this galaxy is in a radial orbit and it generated the stream B in its pericentre passage.
5. Malin 1B: Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova (2010) recognized it as a galaxy interacting with Malin 1. Furthermore, Saha et al. (2021) identified its interaction specifically with the central area of Malin 1, implying it might be responsible for initiating recent star formation in the galaxy (Saha et al. 2021). Moreover, Saburova and Cherepashchuk (2021) regard it as a compact elliptical galaxy (cE).
6. Malin 1A: identified as another compact elliptical (cE), typically located close to larger galaxies and prone to tidal interactions and stripping (Saburova and

Cherepashchuk 2021; Johnston et al. 2024). Malin 1A, along with another system, has undergone significant tidal encounters with Malin 1, leading to the depletion of nearly all their gas (S. Kim et al. 2020).

7. Cavity: A cavity in the southern region in the observed LSB disk of the galaxy indicates a reduced stellar concentration, leading to a hole in its observable section. Furthermore, irregularities in the HI gas distribution observed in the HI data are also noted (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). The cavity in Malin 1 could result from either a local gas depletion or a disruption in its gas distribution. Further details are provided in the Section 3.3.
8. Galaxy SDSS J123657.22+142021.1, ($z = 0.364$) located in the background, at a higher redshift than Malin 1, is a broadline galaxy (Abazajian et al. 2009).
9. HII regions: Identified using VLT-MUSE, such as the one highlighted by a yellow ellipse, indicate recent star formation activity (Junais et al. 2024).
10. Malin 1C: Known as an Ultra Diffuse Galaxy (UDG) according to Ji et al. (2021), and is observed using VLT-MUSE (Junais et al. 2024), identified it as a region of recent star formation at a redshift of $z = 0.08292$. It is positioned at a projected distance of 46.75 kpc from Malin 1, forming part of the Malin 1 surroundings and referred to as Malin 1C. A color-enhanced image of Malin 1C is available, Fig. 1-10, likely, a UDG.. Using the MUSE spectrum in $H\alpha$ emission the mean velocity dispersion for M1C, it is around 54 km/s (Junais et al. (2024, and private communication with Junais.). Moreover, M1C is located exactly on top of the stream B candidate, which would be a natural consequence if this is the core of the stream that is being tidally disrupted.

$$D_L M_V \mu_{0,B} \mu_{0,V} M_{HI} \alpha \delta z V_{\odot}^{\star} D_{opt} i L_r$$

Table 1: Properties of the Malin 1 galaxy. Morphology, luminosity distance , absolute V-band magnitude, , central surface brightness in the B and V band, , , respectively, HI gas

mass range, , active galactic nucleus (AGN), right ascension, , declination, , redshift, , galaxy's Heliocentric systemic velocity, , optical diameter, , inclination, , Luminosity r-band,

Property	
Morphology	SB0/a [a]
D_L	$\sim 377 \pm 8$ Mpc [b]
M_V	-22.9 ± 0.4 [c]
$\mu_{0,B}$	~ 28.0 mag arcsec^{-2} [d]
$\mu_{0,V}$	~ 25.5 mag arcsec^{-2} [e]
$M_{\rm HI}$	$4 - 7 \times 10^{10} \mathrm{M}_{\odot}$ [f]
AGN	LINER [g]
$\alpha\ (J2000)$	$12^h36^m59.35^s$ [h]
$\delta\ (J2000)$	$+14°19'49.16''$ [h]
z	0.0827002 [h]
$V_{\odot}^{\star}$	24775 ± 10 km s^{-1} [h]
$D_{\rm opt} \approx D_{\rm HI} \approx 8D_{\rm MW}$	~ 220 kpc [i]
i	$38° \pm 3°$ [j]

References: [a] Barred lenticular galaxy with faint spiral arm features (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). [b] Luminosity Distance (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). [c] (Pickering et al. 1997), [d] Central surface brightness in the B-band (Galaz et al. 2015), [e] Extrapolated central disk brightness in the V-band (Impey and Bothun 1997), [f] HI gas mass range from Pickering et al. (1997; Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010), [g] AGN activity: Low-Ionization Nuclear Emission-line Region (Barth 2007), [h] α, δ, indicating equatorial coordinates (J2000 is the standard epoch), z, and $V_{\odot}^{\star}$ (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010), [i] Optical and HI diameter, scaled to the Milky Way (Moore and Parker 2006), [j] (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010).

Table 2: Malin 1 and the possible galaxy satellite progenitors of streams are abbreviated (N. indicates the points displayed in Fig. 1)

N.	Full Name	Abbreviation
1	Malin 1	M1
2	Stream A	sA
3	Stream B	sB
4	Exo-Malin 1	eM1
5	Malin 1B	M1B
6	Malin 1A	M1A
10	Malin 1C	M1C

3. (Methodology) Modelling the Malin 1 system

Here we explain in detail how we model the gravitational potential of Malin 1 and the orbits of its satellites and streams. The gravitational potential and orbital models are constrained by observational data, such as the surface brightness profile, rotation curve, and line-of-sight velocities. We used these observations to determine the best-fit parameters for the gravitational potential of Malin 1 using semi-analytical models. In the following sections, we explain the gravitational potential and orbital modelling and more details.

3.1 Observational Data and Constraints

To model Malin 1, the surface brightness profile from observations was applied in different bands: $HST/F814W$ for the central area, within < 15 kpc (Barth 2007), and the r and g bands for the extended disc, reaching out to $100 - 120$ kpc in radius (Moore and Parker 2006; Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010; Saha et al. 2021). In the analysis, we also used the SB profile of the R-band as explained in Lelli, Fraternali, and Sancisi (2010). Furthermore, analysis was conducted on the HI rotational velocity curve, taking into account the stellar, gaseous, and dark matter components. (Pickering et al.

1997; Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). Additionally, the coordinates of x and y for the stream points, using the centre of Malin 1 as the inertial reference frame, were determined by photometric analysis (see Fig. A.1 and Table A.1) and serve as observational data. The x-axis aligns with the right ascension (α) and increases leftward on the sky plane. The y-axis aligns with the declination (δ) and increases northward (upward) in the plane of the sky. The statistical accuracy of each coordinate x and y was enhanced by using the projected angular scale and the median seeing of 0.8 arcsec (Galaz et al. 2015), given a confidence level of ± 1.25 kpc. For the distance r measured from the centre of Malin 1, error propagation was used (see Fig. A.1 and Table A.1).

Moreover, the peculiar velocity of the satellite, denoted V_{Peculiar} and cited from various sources (Dey et al. 2019; Cook et al. 2023; Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010; Saburova and Cherepashchuk 2021; Galaz et al. 2015; Junais et al. 2024; Johnston et al. 2024), is listed in Table 3.

Table 3: Peculiar Velocity, Vlos, and related properties of Malin 1 and associated galaxies.

Galaxy [a]	$V_{peculiar}$[km/s] [b]	Petrosian radius [kpc] [g]	Luminosity [$L_\odot$] [h]	$M/L[M_\odot/L_\odot]$ [n]	$M[M_\odot]$[q]
M1	0 ± 1 [c]	5.6 ± 0.2	6.0×10^{10} [i]	3.4 [i]	4.81×10^{11} [r]
eM1	132 ± 37 [d]	5.2 ± 0.4	9.47×10^{9} [j]	0.9 [o]	8.52×10^{9}
M1B	65 ± 22 [d]	2 ± 2	1.63×10^{9} [k]	3.4 [p]	5.54×10^{9}
M1C	54 ± 28 [e]	1.5 ± 0.5	1.26×10^{8} [l]	0.9 [o]	1.13×10^{8}
M1A	54 [f]	2 ± 2	1.12×10^{9} [m]	3.4 [p]	3.81×10^{9}

a. Galaxies abbreviations, defined in Table 2, and in Fig.[Fig:Malin1EnvironmentIn].
b. Relative radial velocity of the satellite with respect to Malin 1's, and the fact that $z < 0.1$.
c. M1 centre with dispersion which comes from the projected angular scale (Galaz et al. 2015).
d. Reported by Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova (2010).
e. (Junais et al. 2024, and private communication).
f. Our estimation based on both, M1A and M1C having approximately the same distance from the M1 centre.

g. Radius where surface brightness is 20% of the average within it (Petrosian 1976; Psychogyios et al. 2016); data from SDSS SkyServer (2024).
h. Luminosity in Solar units.
i. Our fitting integrated in *R* band using the Isothermal profile.
j. Visual $L_{\rm z}$ band (Cook et al. 2023).
k. cE in r band (SDSS SkyServer 2024).
l. UDG in r band (SDSS SkyServer 2024).
m. cE in r band (SDSS SkyServer 2024).
n. Mass to Light ratio in solar units (Bell and De Jong 2001).
o. M/L value for cE (Bell and De Jong 2001).
p. M/L value for LSB or UDG (Bell and De Jong 2001).
q. Stellar mass in solar units.
r. Stellar mass estimation using the Isothermal profile.

3.2 Malin 1 gravitational potential

To investigate the dynamics of Malin 1 satellites, we need to model its gravitational potential to calculate the orbits of its satellite galaxies.

The modelling process involves two primary phases. Initially, we constructed a model of the Malin 1 light profile using HST / F814W photometric data, as detailed in Section 3.1. We leveraged photometric models that offer analytical solutions with the capability to swiftly compute Malin 1's gravitational field. This facilitates the investigation of an extensive parameter space with innumerable orbital calculations. Specifically, we used a Miyamoto-Nagai potential (Miyamoto N. and Nagai R. 1975), which is ideal for a wide range of mass distributions, from a thin disk to a fully spherical configuration. To represent the bar/bulge substructure, we used one component (Plummer H. C. 1911; Long and Murali 1992), another for the central disc, and yet another for the external large disk component, both configured with Kuzmin profiles (Binney J. and Tremaine S. 2008). In the subsequent phase, photometric models were utilised to fit gas kinematic

observations. For the representation of the dark halo, we implemented both the Navarro-Frenk-White (NFW) profile (Navarro, Frenck, and White 1996), which aligns with the ΛCDM model, and a pseudoisothermal profile (De Blok and Bosma 2002) (refer to Sect. 3.3).

Both profiles are widely used to describe the density distribution of dark matter halos (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010; De Blok and Bosma 2002). NFW assumes that dark mater halos have a characteristic "cuspy" central density and extend over large distances. The pseudoisothermal profile, on the other hand, features a flat central core, which implies a constant density at the centre (Mo 2010).

The gravitational potential model proposed by Miyamoto N. and Nagai R. (1975), eq. (1), depending on the choice of the two parameters a and b, can represent the potential of an infinitesimally thin disk to a spherical system. For example, when $a = 0$, the potential Φ_{MN} simplifies to the Plummer potential (Plummer H. C. 1911). Conversely, if $b = 0$, Φ_{MN} becomes equivalent to the Kuzmin potential characteristic of a razor-thin disk (Binney J. and Tremaine S. 2008). In our analysis, we combined a Plummer core area profile (Plummer H. C. 1911) with two Kuzmin profiles for the central and peripheral regions of the galaxy (Binney J. and Tremaine S. 2008).

$$\Phi_{MN}(R, z) = -\frac{GM}{\sqrt{R^2+\left(a+\sqrt{z^2+b^2}\right)^2}}, \qquad (1)$$

In this context, $R = \sqrt{x^2 + y^2}$, denotes the cylindrical radius within the disc's plane; x, y, z, are the spatial coordinates measured in the Malin 1 centre, while $\sqrt{R^2 + z^2} = r$, indicates the radial separation from that centre, as used in Plummer H. C. (1911). The parameters a and b in eq. (1) define the characteristic length scales. The mass parameter, M, represents the mass accordinlgly, we call $M \equiv M_0$ for the Plummer potential, $M \equiv M_1$ for the central region, and $M \equiv M_2$ for the galaxy's outskirts (see Section 3.3). For photometric modelling, we fit the luminosity of each component L_x. The luminosity can be converted to mass $M_x = \gamma_x L_x$ where γ_x is the stellar mass-to-light ratio in the band x, typically expressed in solar units $M_\odot/L_\odot$. The value of γ_x is determined later during the

fitting of the rotation curve. This process is often carried out under the maximal disk assumption, which posits that the stellar disk contributes the maximum possible fraction of the observed rotation curve before the dark matter halo becomes dominant. However, for LSB galaxies, including Malin 1, this assumption may not always hold, as such systems are generally dark mater dominated at all radii (Binney J. and Tremaine S. 2008; De Blok and Bosma 2002).

Moreover, we consider two dark mater profile models to explore the effects of the mass model on the orbital calculations. These correspond to the NFW model (Eq. 2) and pseudoisothermal model (Eq. 3), defined as:

$$\Phi_{NFW}(r) = -\frac{GM_h \ln(1+r/r_s)}{r}\left[\ln(1+c) - \frac{c}{1+c}\right]^{-1}, \qquad (2)$$

$$\Phi_{Iso}(r) = -4\pi G\rho_0 r_c^2\left[\frac{1}{2}\ln\left(1+\frac{r^2}{r_c^2}\right) + \frac{r_c}{r}\tan^{-1}\left(\frac{r}{r_c}\right)\right]. \qquad (3)$$

In the context of dark mater halos, the NFW model defines the concentration parameter as $c = r_{200}/r_s$. Here, r_{200} is the virial radius where the density becomes 200 times the critical density of the Universe, while r_s signifies the scale radius of the halo. On the other hand, in the pseudoisothermal profile (De Blok and Bosma 2002), the parameter r_c defines the core radius, and ρ_0 indicates the central density of the dark matter halo.

The pseudoisothermal profile generally leads to an increased virial mass and radius, due to its flat inner region and slower decline in density, allowing more mass to gather in the halo, which could better suit Malin 1.

In addition, Malin 1 has a HI disk component (Bothun et al. 1987; Pickering et al. 1997). To include this in the gravitational model, we used a Miyamoto-Nagai potential with a mass of $M_{HI} = 6.7 \times 10^{10} M_\odot$ (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010), scale length $a_{HI} = a_2$, which corresponds to the LSB part of the galaxy, and height $z = 0.3$ kpc. This last value is also

applied to Kuzmin components. Furthermore, factors 1.1 for molecular H_2 and 1.4 for helium gas were included (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). Together, these components represent the mass of the baryonic gas.

To maintain conciseness, the abbreviations defined in Table 2 will be used to describe the scenarios presented in Table 4, with additional details provided in Subsec. 3.3. To explore the dynamic properties of Malin 1 satellites, we initially examined their surface brightness profile and rotation curve using MCMC-EMCEE (Foreman-Mackey et al. 2012; Hogg, Bovy, and Lang 2010). These models yield disk parameters that define the galaxy's mass distribution and gravitational semi-analytical potentials. Following these findings, we performed an orbital analysis with DELOREAN (Blaña et al. 2020), a computational tool designed to reconstruct orbital trajectories based on potential models. This analysis enables the estimation of unknown parameters, including spatial coordinate z, tangential velocity $V_{\rm tg}$, and position angle θ. Furthermore, we determine the pericenter $R_{\rm peri}$, apocenter $R_{\rm apo}$, and orbital ellipticity ϵ, facilitating in the characterisation of the movement of satellites and the connection with streams within the galaxy system.

The disk parameters are reported in Table B.1, where a_0, means the Plummer radius, a_1, and a_2, are the length scales for the Kuzmin components. L_0, L_1, and L_2, are the corresponding luminosity values for the bulge, central, and LSB parts of the disk.

3.3 Setup for the exploration of scenarios for the progenitor candidates of the stellar streams

In this section, we define different scenarios to identify potential progenitor candidates that have an orbital connection with the observed stellar streams. Studies in the literature about the disruption of satellite galaxies and the formation of stellar streams with N-body simulations typically show that the remaining satellite core has a leading and a trailing component (Fellhauer et al. 2006; Smith et al. 2013, and references therein).

Moreover, satellites and their streams can have different morphologies that depend on the potential of the host and, more importantly, on the eccentricity of the orbit. Very circular orbits can produce ring-like streams or polar ring streams, as observed in the Sombrero galaxy (Martínez-Delgado et al. 2021). Radial orbits can produce a more diverse morphology depending on the location where the satellite and the streams are observed in their common orbit. For example, a satellite can be preferentially closer to one of its streams, with the trailing stream being closer to the apocentre and the leading arm could be tidally compressed while entering the host, with the bound core somewhere in the middle of the orbit. (see Fig. 1 in Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012).

Therefore, we required to consider all detected satellite galaxies near Malin 1 as done in Section 2, and to explore a wide selection of possible scenarios. Table 4 offers a detailed summary of our scenarios, using the abbreviations listed in Table 2. Scenarios include Malin 1 (M1), Malin 1A (M1A), Malin 1B (M1B), Malin 1C (M1C), exo-Malin 1 (eM1), stream A (sA) and stream B (sB). The analysis focusses on scenarios and cases relevant to orbital dynamics and possible progenitor satellites for the streams. Each scenario is evaluated using two distinct gravitational potentials independently applied to Malin 1. As explained in Section 3.2 the models used are the NFW model and the isothermal model. The resulting properties and masses are reported in Section 4.1, but we report a range between $M_{Virial} = 1.7 \times 10^{12}\ M_{\odot}$ and $M_{Virial} = 3.8 \times 10^{12}\ M_{\odot}$. Given that the satellite-host mass ratio is small, we model the orbits of the satellites and the streams as test particles where $\frac{M_{Satellite}}{M_{Malin\ 1}} < 0.01$.

In all cases, orbital calculations of satellite galaxies and stellar streams were performed using an updated version of the software DELOREAN (Blaña et al. 2020), which was combined with EMCEE and parallel computations to explore a large parameter space and fit observables (Blaña et al. in prep.). This allowed us to explore more than 100 million

orbits, including all scenarios, much faster than exploring each scenario with full N-body simulations.

The inputs included stream coordinates, Line-Of-Sight (LOS) velocities, and satellite distances from the Malin 1 center, shown in Table A.1. The outputs consist of spatial coordinates z, tangential velocity $V_{\rm tg}$, Position Angle θ, along with the pericenter $R_{\rm peri}$, apocenter $R_{\rm apo}$, and ellipticity ϵ. Some common values for all scenarios are the Virial Ratio range $\eta = [-1{,}0]$, where $\eta = 2KE/PE$, to ensure the negative potential energy needed for the bound satellites. The initial positions and their radial distance from the satellites are shown in Table A.1. In all cases, both dark matter profiles, NFW, and isothermal were tested. However, the last one gives us a better fit. The z-axis points in the direction of $-V_{\rm los}$, corresponding to a positive motion along the line of sight through us. So, $v_z = -V_{\rm los}$. The stream points, sA and sB, are shown in Fig. A.1 and the values in Table A.1.

Table 4: Scenarios and cases regarding orbital dynamics and satellite progenitor candidates for streams. Each scenario has been evaluated using two halo models: the NFW model, and the Isothermal model. The NFW model has and kpc, with a concentration parameter . The Isothermal model considers and kpc. $M_{Virial} \approx 1.7 \times 10^{12}\, M_{\odot} R_{Virial} \approx 247 c = 10.585 M_{Virial} \approx 3.8 \times 10^{12}\, M_{\odot} R_{Virial} \approx 323$

Scenario	Case	Progenitor Candidate and Stellar Streams
I	a	eM1 + sB
	b	eM1 + sA + sB
II	a	M1C + sB
	b	M1C + sA + sB
III	a	M1B + sB
	b	M1B + sA + sB
IV	a	M1A + sA
	b	M1A + sA + sB
V	a	sA

	b	sB

We defined five scenarios, with two subcases each, having a total of 10 configurations. These are summarized in Table 4, and are the following:

- Scenario I-a: eM1+sB.

  In this Scenario, eM1 and sB constrain the current tangential velocity of eM1 by computing various orbits backward in time. This scenario is interesting because sB seems to connect the M1 centre with the eM1 offset position directly (see region 3 and 4 in Fig. 1). To explore the radial and polar orbits, we used the following ranges: first $[-13.0,20.0]$ Gyr and next $[9.0,3.7]$ Gyr, $z \in [-800,-300]$ kpc, and $z \in [-343,0]$ kpc. Tangential velocity values that would lead to eM1's orbit that entered and left Malin 1's dark halo (Deason and Belokurov 2024). So, for both situations, a tangential velocity $V_{\mathrm{tg}} \in [0,1000]$ km/s, and $\theta \in [0°, 90°]$, covering the natural direction of eM1. For this analysis, a MCMC-EMCEE approach was employed to estimate parameter uncertainties. The configuration involved the number of walkers, $n_{\mathrm{walkers}} = 797$, steps, $n_{\mathrm{steps}} = 2997$. All to ensure robust convergence. The observed radial and positional data for eM1 is: radial distance $R = 350.0$ kpc and LOS velocity $V_{\mathrm{los}} = 132$ km/s (Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova 2010). The eM1 coordinates are $x = -211.38$ kpc, $y = 277.78$ kpc, with $v_z = -V_{\mathrm{los}}$.

- Scenario I-b: eM1+sB+sA.

  It is possible that both streams, sA and sB, originated from eM1, with sA forming first, followed by sB. The following constraints were applied to explore this hypothesis: a z range of $z \in [-800,-300]$ kpc, and a tangential velocity between $v_t \in [0,1000]$ km/s and $\theta \in [0°, 360°]$.

- Scenario II-a: M1C+sB.

  The origin of stream sB remains uncertain. A fascinating hypothesis is that M1C could have generated both the forward and backward segments of sB, indicating that the observed stream might be undergoing a degenerative process. This hypothesis suggests that the leading and trailing segments are observable, with M1C core placed, as seen in other systems (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012; Bonaca et al. 2021). To investigate this, orbital calculations were carried out in both temporal directions - forward (leading) and backward (trailing) - for M1C. Various parameter ranges for z, v_t, and θ were used. These included $z \in [-43,-0]$ kpc, along with a tangential velocity of $v_t \in [300,500]$ km/s and an angular direction $\theta \in [0°, 360°]$.

The initial configuration MCMC-EMCEE involved the following settings: $n_{\text{walkers}} = 170$, $n_{\text{steps}} = 1300$, $\text{discard} = 0.2$, $\text{samplefr} = 1$, with an integration time $[-0.5,0.3]$ Gyr, to ensure the study of the degenerative process. η = -1.0 due a bigger negative potential energy would be needed for M1C. The observed radial, LoS velocity and positional data for M1C is $R = 14$ kpc, $V_{\text{los}} = 54$ km/s (Junais et al. 2024, and private communication), and $x = -21.96$ kpc, $y = 41.80$ kpc, with $v_z = -V_{\text{los}}$.

- Scenario II-b: M1C+sB+sA.

  Here we continue our hypothesis that M1C could have generated not only the forward and backward segments of sB, but the possible connection between both streams, sA and sB, with M1C as the progenitor. To search for this possibility, the initial setup for the parameter ranges is $z \in [-100,0]\,\text{kpc}$, along with a tangential velocity of $v_t \in [0,570]\,\text{km/s}$ and an angular direction $\theta \in [0°, 360°]$. For MCMC-EMCEE involved, $n_{\text{walkers}} = 400$, $n_{\text{steps}} = 1300$, $\text{discard} = 0.2$, with an integration time $[-0.5,0.3]$ Gyr, to ensure the study of the degenerative process. The observed radial, LoS velocity, and positional data for M1C are the same as in Scenario II-a.

- Scenario III-a: M1B + sB.

  This scenario is particularly interesting, as it explores M1B as the possible progenitor of sB. Therefore, sB might consist of debris from stars and gas that once belonged to the compact elliptical M1B. This investigates tangential velocity values that would lead to M1B orbit inside the Malin 1 dark halo. The parameter ranges include a spatial range $z \in [-43,43]$ kpc, a tangential velocity $V_{\text{tg}} \in [0,400]$ km/s, and $\theta \in [0°, 360°]$, covering all spatial orientations. The setup of MCMC-EMCEE is $n_{\text{walkers}} = 197$, $n_{\text{steps}} = 900$, $\text{discard} = 0.2$, integration time $[0, [-6.7,1.3]$Gyr. The observed radial, LoS velocity, and positional data for M1B is $R = 14$ kpc, $V_{\text{los}} = 54$ km/s (Junais et al. 2024, and private communication), and $x = 11.93$ kpc, $y =, -7.65$ kpc and $v_z = -V_{\text{los}}$.

- Scenario III-b: M1B + sA + sB.

  This scenario investigates the possible connection between streams sA and sB with M1B as progenitor.

To investigate this, orbital calculations were carried out in both temporal directions - forward (leading) and backward (trailing) - for M1B. $z \in [-71,0]\,\text{kpc}$, along with a tangential velocity of $v_t \in [0,999]\,\text{km/s}$ and an angular direction $\theta \in [0°, 90°]$. The configuration MCMC-EMCEE involved the following settings: $n_{\text{walkers}} = 397$, $n_{\text{steps}} = 1300$, with an integration time $[-7.5,7.5]$ Gyr, to place M1B at the core of the degenerative process stream. Observational data are the same as Scenario III-a.

- Scenario IV-a: M1A+sA.

  In this scenario, look for an orbit in which M1A is the progenitor of sA. Upon a review of the Milky Way streams (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012), one can see that they go perpendicular to the galactic plane. So, we have the possibility that sA is continuing this situation. This hypothesis says that M1A could be responsible for sA. To investigate this, orbital simulations were conducted applying the following parameters tested, which included $z \in [-243.0,0.4]\,\mathrm{kpc}$, along with a tangential velocity of $v_t \in [0,500]\,\mathrm{km/s}$ and an angular direction $\theta \in [0°, 360°]$.

The MCMC-EMCEE configuration involved the following settings: $n_{\mathrm{walkers}} = 397$, $n_{\mathrm{steps}} = 977$, with an integration time $[-1.7,0.4]\,\mathrm{Gyr}$. The LoS velocity was adopted as the same as M1B, that is, $V_{\mathrm{los}} = 54$ km / s (Junais et al. 2024, and private communication).

- Scenario IV-b: M1A+sA+sB.

  In this scenario, we explore the same origin for both sA and sB. A compelling hypothesis is that M1A could be responsible for the leading and trailing parts of sA and be in some way connected to sB. This hypothesis suggests that the leading and trailing segments are observable, with M1A core placed, as seen in other systems (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012; Bonaca et al. 2021). To investigate this, various parameter ranges for z were employed. These included $z \in [-13,0]\,\mathrm{kpc}$, along with a tangential velocity of $v_t \in [350,500]\,\mathrm{km/s}$ and an angular direction $\theta \in [0°, 360°]$. The configuration MCMC-EMCEE involved the following settings: $n_{\mathrm{walkers}} = 397$, $n_{\mathrm{steps}} = 597$, with an integration time $[-0.7,3.0]\,\mathrm{Gyr}$, to ensure the study of the degenerative process.

- Scenario V-a: sA. The progenitor was destroyed.

  In this scenario, a possible origin of sA is explored. The hypothesis is that sA could be a fingerprint of the history of assembly of a galaxy (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). To investigate this, orbital calculations were carried out in a leading integration. Parameter ranges for $z \in [-10,0]\,\mathrm{kpc}$, along with a tangential velocity of $v_t \in [300,700]\,\mathrm{km/s}$ and an angular direction $\theta \in [180°, 270°]$. The configuration MCMC-EMCEE involved the following settings: $n_{\mathrm{walkers}} = 397$, $n_{\mathrm{steps}} = 1700$, with an integration time $[-7.5.,0.3]\mathrm{Gyr}$. The closest sA point to M1 was taken as a focus point in the analysis, with $x = -11.93$ kpc, $y = -7.65$ kpc, and we include $z = 0.01$ to define the spatial position for this case.

- Scenario V-b: sB. The progenitor was destroyed.

In this final scenario, another possibility of a destruction event is examined. The hypothesis is that the progenitor sB might be dismantling the satellite galaxy through gravitational tidal forces (Panithanpaisal et al. 2021). Hence, it is plausible that we observe signs of the disintegration process of the progenitor sB. To delve into this, orbital computations were performed using forward(leading) integration. Various values for z were studied to examine planes both above and below the galaxy. These values included a tangential velocity of $v_t \in [500{,}900]\,\mathrm{km/s}$ and an angular direction $\theta \in [0°, 90°]$. The MCMC-EMCEE configuration used the following parameters: $n_{\mathrm{walkers}} = 397$, $n_{\mathrm{steps}} = 1997$, and an integration time $[-0.3{,}0.4]\,\mathrm{Gyr}$. LOS velocity $V_{\mathrm{los}} \approx 54$ km / s was chosen using a similar value of point C in sB (Junais et al. 2024). The coordinates of the closest sB point to M1 were $x = -10.61$ kpc, $y = 29.37$ kpc, $z = -24.22$ kpc. The last component z was calculated as the projection over the galactic plane. And $v_z = -V_{\mathrm{los}}$.

The results are shown in Section 4.2.

4. Results

In the first part, we report our results on the light and potential modelling of Malin 1. Then we proceed to report on our modelling of the stellar streams. Lastly, a ranking was proposed together with some practical physical calculations.

4.1 Mass and potential models for Malin 1

The surface brightness profile and the rotation curve fitting were analysed using MCMC-EMCEE, and are shown in Fig 2, upper and bottom panels, respectively. The best-fit parameters derived here were later used as input for orbital analysis with DELOREAN (Blaña et al. 2020), to estimate unknown variables, the spatial dimension z, the tangential velocity V_{tg}, and the position angle θ. Furthermore, the pericenter R_{peri}, the apocenter R_{apo}, and the ellipticity ϵ are calculated.

In the upper panel of Fig. 2, we display R band data points as reported by Lelli, Fraternali, and Sancisi (2010). The diagram exhibits a Plummer profile that represents the galaxy's core, along with two separate Kuzmin profiles, one characterising the central area and

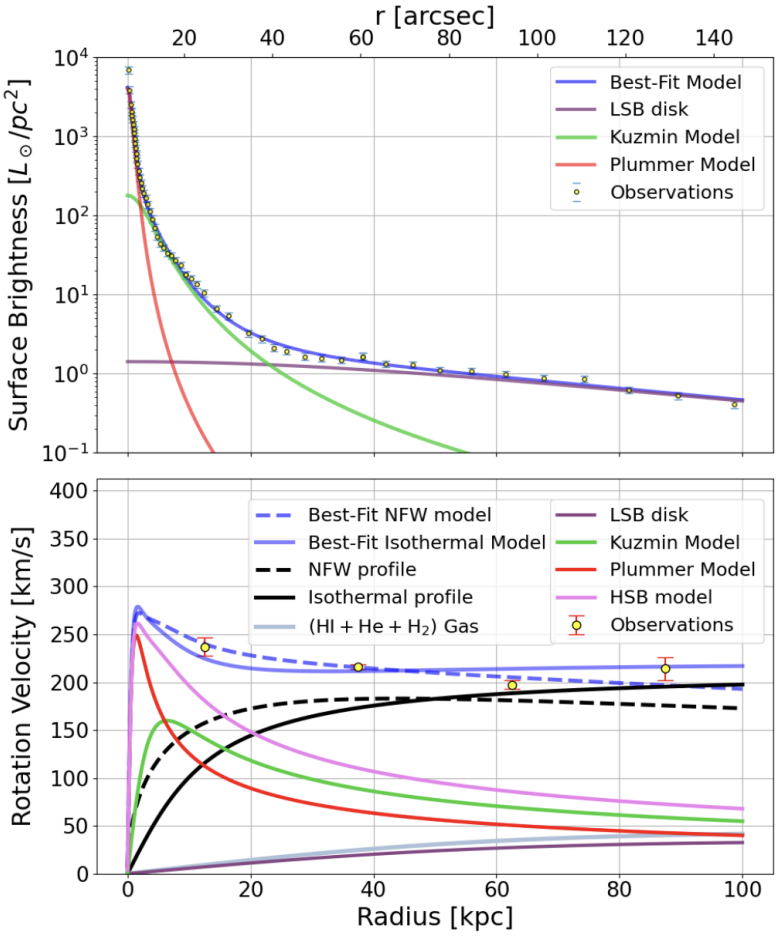
another for the outskirts, to simulate the LSB disk of the galaxy. In addition, the figure displays the Best-Fit model.

The bottom of figure 2 presents the rotation velocity fitting for two dynamical models, NFW and pesudo-isothermal dark matter profiles. The four HI data points were obtained by Lelli, Fraternali, and Sancisi (2010; Pickering et al. 1997). The diagram dissects various components, including the Plummer and Kuzmin models, which describe the core and peripheral sections of galaxies, as well as the gas constituents HI, He, and H_2. It also considers both High- and Low-Surface Brightness regions (HSB and LSB) and includes two dark mater halo models: the NFW model and the pseudoisothermal.

Figure 3 illustrates the optimized emcee fit parameters for the surface brightness model, while Figure 4 shows the equivalent parameters for the rotation curve model. The data compiled for the two profiles is presented in Tables B.1. In particular, the key parameters include the following. $L_0 = 1.25^{+0.06}_{-0.06} \times 10^{10}\, L_\odot$, $L_1 = 2.33^{+0.07}_{-0.07} \times 10^{10}\, L_\odot$, $L_2 = 7.1^{+0.6}_{-0.5} \times 10^{10}\, L_\odot$, $a_0 = 1.00^{+0.05}_{-0.05}$ kpc, $a_1 = 4.6^{+0.3}_{-0.3}$ kpc, and $a_2 = 94^{+7}_{-6}$ kpc. An important factor affecting the accuracy of mass modelling is the exact value of stellar mass-to-light ratios (denoted Υ). $\Upsilon_{NFW} \simeq 3.2\, \Upsilon_\odot$ for the NFW dark matter halo and $\Upsilon_{Iso} \simeq 3.4$ for the isothermal dark matter halo, in good agreement with Lelli, Fraternali, and Sancisi (2010). For the Malin 1 NFW halo, the parameters are $M_h(r_{200}) = 1.7 \times 10^{12}\, M_\odot, r_{200} = 246$ kpc, and $l_s = 22^{+6}_{-3}$ kpc, resulting in a concentration of $c_{200} = 10.585$. The Malin 1 pseudo-isothermal halo parameters include the density of the central halo, $\rho_0 = 8.8363 \times 10^6\, M_\odot\, pc^{-3}$ and the radius of the core of the halo, $r_c = 9.738$ kpc.

Figura 2: Top panel: shows the observed surface brightness data in the R band (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010). In addition, we show our fits of a Plummer and a Miyamoto-Nagai (Kuzmin) profiles for the central region and another Miyamoto-Nagai profile for the LSB disk component. Bottom panel: shows the observed HI rotation curve (Lelli,

Fraternali, and Sancisi 2010). We also show the models fitted photometrically (Plummer and two Miyamoto-Nagai) for the stellar component, and a Miyamoto-Nagai disk for the gaseous component. We also show the fitted dark matter halo models NFW and pseudoisothermal.



Following Barth (2007), we distinguished between High-Surface Brightness (HSB) and Low-Surface Brightness (LSB) galaxies based on their central surface brightness, adopting the common threshold of $\mu_B = 23.0\,\mathrm{mag\ arcsec^{-2}}$ (Impey and Bothun 1997). Using these parameters, we were able to examine the orbital solutions belonging to the various scenarios depicted in Section 3.3. For each scenario, we utilized both NFW and isothermal halo models to determine orbital solutions and discovered that the outcomes did not vary significantly.

Figura 3; The posterior distributions and covariances for the optimal parameters derived from the emcee-mcmc analysis regarding surface brightness fitting are presented (see Fig. 1, upper panel). These parameters pertain to the model, where a_0, a_1, and a_2 denote characteristic length scales, and L_0, L_1, L_2 represent the measured luminosities in each segmented region of the SB: Plummer for the central region, a Kuzmin profile for the medium section, and another Kuzmin profile for the LSB or peripheral areas. The diagonal histograms reflect the marginalized distributions for each parameter, with vertical dashed lines marking the 16th, 50th, and 84th percentiles (approximately 1-sigma uncertainties), while the contour plots illustrate the covariances between parameter pairs. The peak of each histogram indicates the parameter's most likely value. The legend outlines the optimal parameter estimates along with their uncertainties, which are essential to the model of the galaxy's surface brightness.

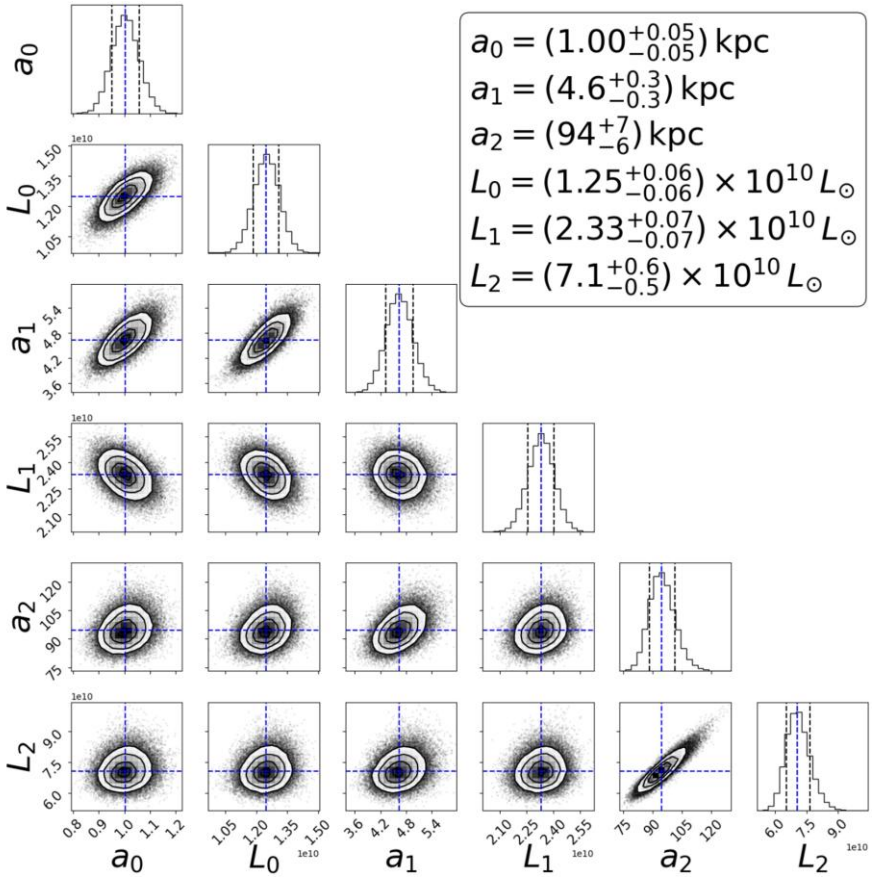
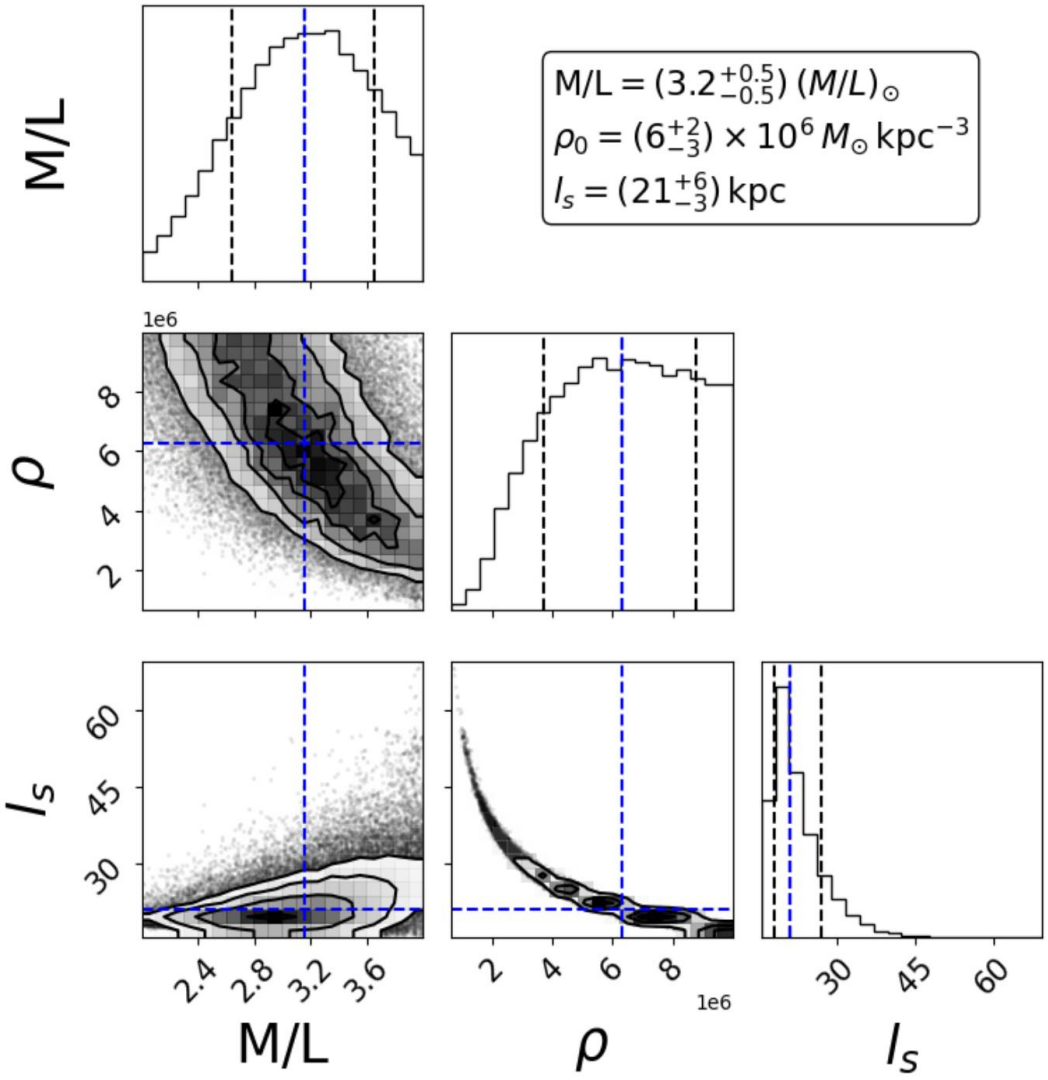


Figura 4: The emcee-mcmc analysis of the rotation curve fitting (Figure 1, lower panel) using the NFW profile, provides posterior distributions and covariances for parameters such as the mass-to-light ratio (M/L), central density ρ, and scale length l_s. On the diagonal, histograms display the marginalized distributions for each parameter, with vertical dashed lines marking the 16th, 50th, and 84th percentiles (approximately 1σ uncertainties). The contour plots depict the covariances, illustrating parameter correlations. The legend presents the best-fitting parameter values and their uncertainties, which are crucial to the galaxy's rotation curve model.



4.2 Possible progenitor candidates of the stellar streams and findings

In this study, we detail the results of our orbital fitting procedures applied to both stellar streams and satellite galaxies. Using DELOREAN (BLAÑA ET AL. 2020), we investigated around 10 million orbits per scenario, which is a comprehensive analysis of 100 million orbits. This included two configurations for the Malin 1 potential, encompassing both radial and circular orbits, along with evaluations of bound and :, and energy evaluations through the virial ratio. Here, we highlight the solutions that most accurately correspond to the observational data and adhere to physical constraints, such as having bound orbital solutions. However, unbound solutions were also found.

From the ten scenarios analyzed, a preliminary classification is as follows.

- Present a progenitor: Ia, IIIa, IVa and Va.
- Progenitor destroyed: Va, and Vb.
- Two streams linked: IIb.
- Unbound orbit: Ib, IIIb, and IVb.

Here we discuss the main physical parameters obtained from the modelling in each scenario.

- Scenario I-a: eM1 + sB. subcases:, eM1 + sB - radial, and eM1 + sB - polar For only this scenario we will study two orbital solutions: a radial orbit known here as Scenario I-a-radial, depicted in Fig. 5. and a polar orbit known as Scenario I-a-polar, depicted in Fig. 6. The motivation lies in our quest to identify both radial solutions, where the stellar streams are either converging towards or diverging from the center of Malin 1, experiencing the most intense tidal forces, as well as polar solutions, similar to those observed in the Sombrero galaxy (Martínez-Delgado et al. 2021).

  Fig. 5 (Scenario I-a-r), panel i) shows the best radial orbit fit, integrated $[-13.0,20.0]$ Gyr into the optical image of Malin 1 and its surroundings (Galaz et al. 2015). This path links eM1 (denoted by a red star) with stellar stream B (marked by magenta

crosses) after making a pass near the Malin 1 disc. For this orbit, the pericenter crossing of eM1 occurred approximately -1.3 Gyr ago. The colour bar illustrates the LoS velocities along the orbit, with a maximum variation of $\Delta V_{\rm LoS} \approx 500$ km/s. This suggests that sB might be associated with eM1, as the trailing segment that was stripped from eM1 in their passage. Panel ii) Shows the plot of distance versus time and velocity versus time shows the satellite's motion around Malin 1. The maximum likelihood of the pericenter and the velocity was found at about 41 kpc and $|V| \approx 587$ km/s, respectively, which happened ~ -1.3 Gyr ago. Panel iii) Shows the X-Z and Y-Z planes of the orbit. Panel iv) Corner plots show the likelihood distribution of all orbits, the optimal fit parameters in the 50% percentile are $z \sim -8$ kpc, $v_t \sim 532$ km/s, PA$\sim 39°$. Panel v) The maximum likelihood probability showing a pericentre of $R_{\rm peri} \sim 465$ kpc and an apocentre of $R_{\rm apo} \sim 4995$ kpc and $\epsilon \sim 0.44$.

Figura 5: Scenario I-a (radial): eM1+sB-radial. Panel i) A possible radial orbit integrated [−13.0, 20.0] Gyr over the optical image of Malin 1 and its environment (Galaz et al. 2015) that connects eM1 (red star) with the stellar stream B (magenta crosses) in the first passage by the Malin 1 disc. For this orbit, the pericenter passage of eM1 was ∼ −1.3 Gyr ago. The color-bar shows the LOS velocities along the orbit, having a maximum difference of ΔVLoS ≈ 500 km/s. This could be that sB are the trailing part of eM1 as the progenitor. Legend shows stellar stream mark, the time for the progenitor (eM1), denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) stream times with a common dot for both showing the colour or velocity of eM1 in that moment of the orbit. The isothermal profile was employed for the dark matter. Panel ii) Distance vs time plot and Velocity vs time illustrating the satellite's kinematics around Malin 1. Pericenter and velocity maximum likelihood were obtained at ≈ 41 kpc and |V| ≈ 587 km/s. Panel iii) X-Z and Y-Z orbital planes. The observer would be located at the top of these subpanels, at positive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Legend shows the time for the progenitor, Ti = 0 Gyr (present), and the Trailing, in purple colour, (TT = −13 Gyr) and the

Leading, in light green colour, (TL = 20 Gyr). The best orbit has z ~ −8 kpc, vt ~ 532 km/s, PA ~ 39◦, Rperi ~ 465 kpc, Rapo ~ 4955 kpc, and ϵ ~ 0.44.

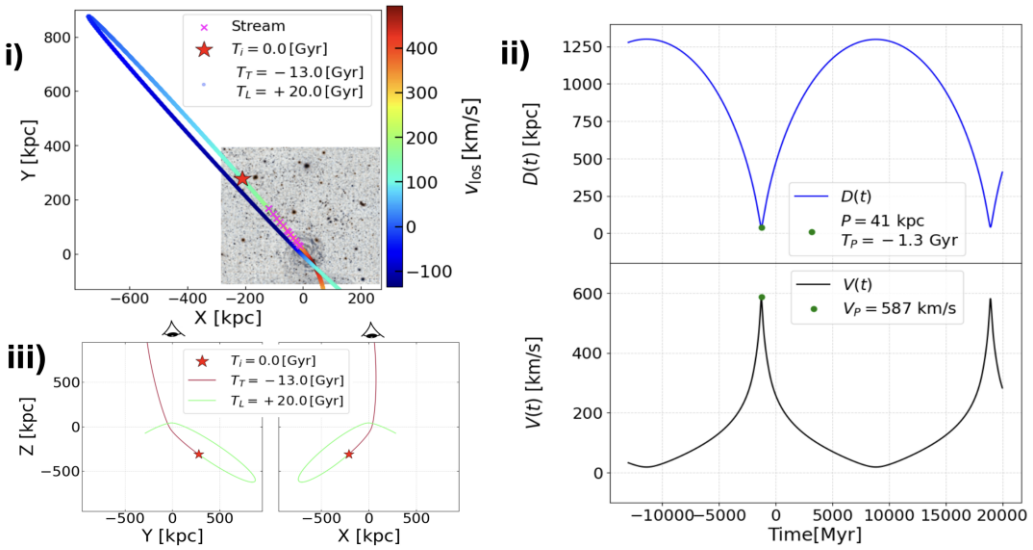
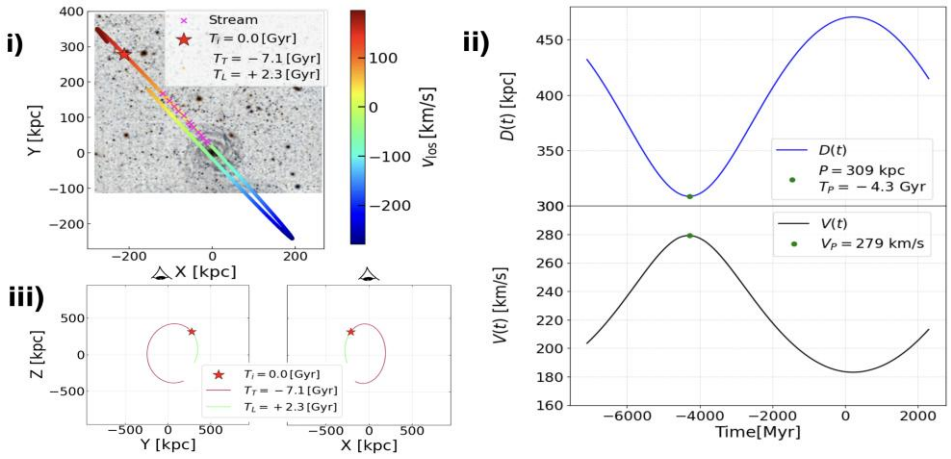


Fig. 6. (Scenario I-a-p), panel i), presents the best polar orbit. It was integrated $[-9.0, 3.7]$ Gyr into the optical image of Malin 1 and its surroundings (Galaz et al. 2015). This path links eM1 (denoted by a red star) with stellar stream B (marked by magenta crosses) after making a pass near the Malin 1 disc. For this orbit, the pericenter crossing of eM1 occurred approximately -1.3 Gyr ago, approximately the same time found in the radial orbit, shown in Fig.[fig:Scelar], however, with a different pericenter value. The colour bar illustrates the LoS velocities along the orbit, with a maximum variation of $\Delta V_{\rm LoS} \approx 350$ km/s. This suggests that sB might be associated with eM1 through a polar orbit. Panel ii) plots distance versus time and velocity versus time. The pericenter and velocity were found at about 193 kpc and $|V| \approx 370$ km / s, respectively, which occurred ~ 1.3 Gyr ago. Panel iii) Shows the X-Z and Y-Z planes, and confirm a polar orbit. From the likelihood distribution of all orbits (not shown), the optimal fit parameters in the 50% percentile are $z \sim -8$ kpc, $v_t \sim 532$ km/s, PA~ 39°, with the model with

maximum likelihood probability showing a pericentre of $R_{\text{peri}} \sim 357$ kpc and apocentre of $R_{\text{apo}} \sim 4774$ kpc and $\epsilon \sim 0.47$.

Figura 6: Scenario I-a (polar): eM1+sB-polar. Panel i) A possible polar orbit integrated [−9.0, 3.7] Gyr over the optical image of Malin 1 and its environment (Galaz et al. 2015) that connects eM1 (red star) with the stellar stream B (magenta crosses) in the second passage by the Malin 1 disc. For this orbit, the pericenter passage of eM1 was ∼ −4.3 Gyr ago. The color-bar shows the LOS velocities along the orbit, having a maximum difference of ΔVLoS ≈ 350 km/s. This could be that sB are the trailing part of eM1 as the progenitor. Legend shows stellar stream mark, the time for the progenitor (eM1), denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) stream times with a common dot for both showing the colour or velocity of eM1 in that moment of the orbit. The isothermal profile was employed for the dark matter. Panel ii) Distance vs time plot and Velocity vs time illustrating the satellite's kinematics around Malin 1. Pericenter and velocity maximum likelihood were obtained at ≈ 193 kpc and |V| ≈ 370 km/s. The best orbit has z ∼ −8 kpc, vt ∼ 532 km/s, PA∼ 39◦, Rperi ∼ 357 kpc, Rapo ∼ 4455 kpc, and ϵ ∼ 0.47. Panel iii) X-Z and Y-Z orbital planes. The observer would be located at the top of these subpanels, at positive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Legend shows the time for the progenitor, Ti = 0.0 Gyr (present), and the Trailing, in purpple colour, (TT = −7.1 Gyr) and the Leading, in light green colour, (TL = 2.3 Gyr). We can see an equivalent stellar stream like the one around the Sombrero galaxy (Martínez-Delgado et al. 2021).



- Scenario I-b: eM1 + sB + sA.

  In our search for a radial orbit or approximation to it, a confirmed apparently unbound orbit was found. The pericentric passage is elevated, 575 kpc with a velocity of 660 km/s which happened 0.77 Gyr ago. A radial orbit was not possible to find to fit both streams simultaneously. The unbound orbit is shown in panel i) Fig. B.1.

- Scenario II-a: M1C + sB.

  This scenario explores M1C as the progenitor of sB, suggesting that sB might contain leftover stars and undetected gas that were once linked to M1C. The detailed examination of one probable orbit is presented in panel iv) in Fig. B.1, integrated over $[-13.0,0.1]$ Gyr, illustrating potential stream disintegration in both trailing and leading sections in sB (indicated by magenta crosses), with M1C (marked by a red star) at the core of sB. It experienced a pericentre passage ~ 9 Gyr ago, currently it would be approaching for the second time, currently entering Malin 1. This scenario would naturally explain the formation of the sB stream in the past encounter 9 Gyr when M1C had its first in-fall. Currently, the stream and M1C would be under tidal compression as it approaches Malin 1. The orbit overlayed on the optical image of Malin 1 and its peripheries (Galaz et al. 2015). The colour bar shows LOS velocities that can reach $\Delta V_{\mathrm{LoS}} \approx 500$ km/s, indicating significant dynamic interactions over time. Interestingly, this scenario has been reached also in scenario II-b explained to continuation.

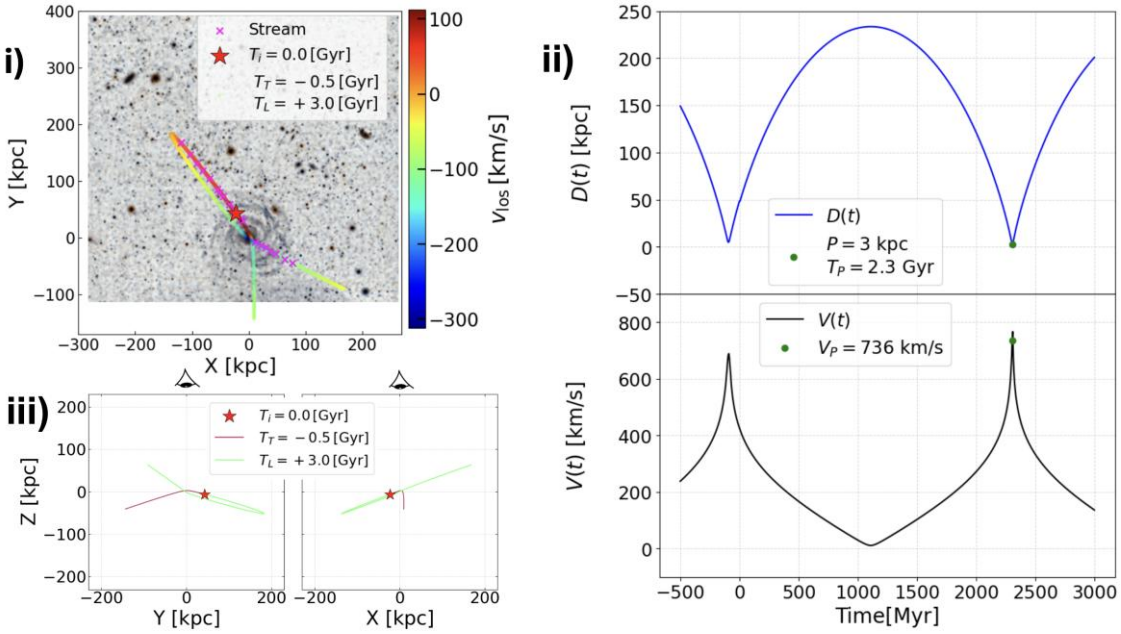
- Scenario II-b: M1C + sB + sA.

  This setup investigates the possible link between both streams, sA and sB, with M1C as the progenitor. This suggests that sA and sB may be composed of stellar remnants formerly associated with M1C. Figure 7 illustrates the proposed orbit and its examination in three different panels. Panel i) Displays an example of an integrated orbit over $[-0.5,3.0]$ Gyr, illustrating the best-fitted orbit showing a possible stream disintegration in both the trailing and leading sections (indicated by magenta crosses). M1C is marked by a red star in the centre of sB. In this

possible tidally disrupting system, both the leading and the trailing arms cover both streams, as illustrated by Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans (2012). The orbit overlayed on the optical image of Malin 1 and its peripheries (Galaz et al. 2015). The colour bar shows LoS velocities that can reach $\Delta V_{\rm LoS} \approx 400$ km/s. Panel ii) The distance versus time plot outlines the orbital movement of the satellite. The pericenter value ~ 3 kpc and a velocity magnitude of approximately $|V| \sim 736$ km / s occurred with the leading arm ~ 2.3 Gyr. Panel iii) X-Z and Y-Z planes of the orbit. For the corner plots (not displayed) the optimal parameters are $z \sim -64$ kpc, $v_t \sim 378$ km/s, PA$\sim 217°$, with orbital characteristics that include a periapsis around $R_{\rm peri} \sim 49$ kpc, an apoapsis of $R_{\rm apo} \sim 296$ kpc, and an ellipticity $\epsilon \sim 0.30$. Interestingly, Scenario I-b was reach in the first passage.

Figura 7: Scenario II-b: M1C+sB+sA. Panel i) An example of an orbit integrated over [−0.5, 3.0] Gyr show not only a possible association of the stream in their trailing and leading parts in sB shown by magenta crosses with M1C represented by a red star in the core, but also the orbit connects sA in the second pericenter passage. It is superimposed on the optical image of Malin 1 and its surroundings (Galaz et al. 2015). The color-bar illustrates LoS velocities along the orbit, having a maximum difference of ΔVLoS ≈ 500 km/s. This could be that both components of sB shows the trailing and leading stream components with M1C as the progenitor. In addition, the leading shows a link with sA. Legend shows stellar stream mark, the time for the progenitor (M1C), denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) times with a common dot for both showing the colour or velocity of M1C at that specific moment of the orbit. The isothermal profile was employed for the dark matter. Panel ii) Distance vs time, and a magnitude velocity vs time with |V| ≈ 736 km/s. In this orbit, the trailing pericenter passage of M1C occurred approximately −0.1 Gyr ago, and 2.3 Gyr for the leading arm. Panel iii) X-Z and Y-Z orbital planes. The best orbit has z ∼ −64 kpc, vt ∼ 378 km/s, PA∼ −217◦, Rperi ∼ 49 kpc, Rapo ∼ 296 kpc, and ϵ ∼ 0.30. The observer would be located at the top of these subpanel, at positive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Legend shows the time for the

progenitor, Ti = 0.0 Gyr (present), and the Trailing, in purple colour, (TT = −0.5 Gyr) and the Leading, in light green colour, (TL = 3.0 Gyr).

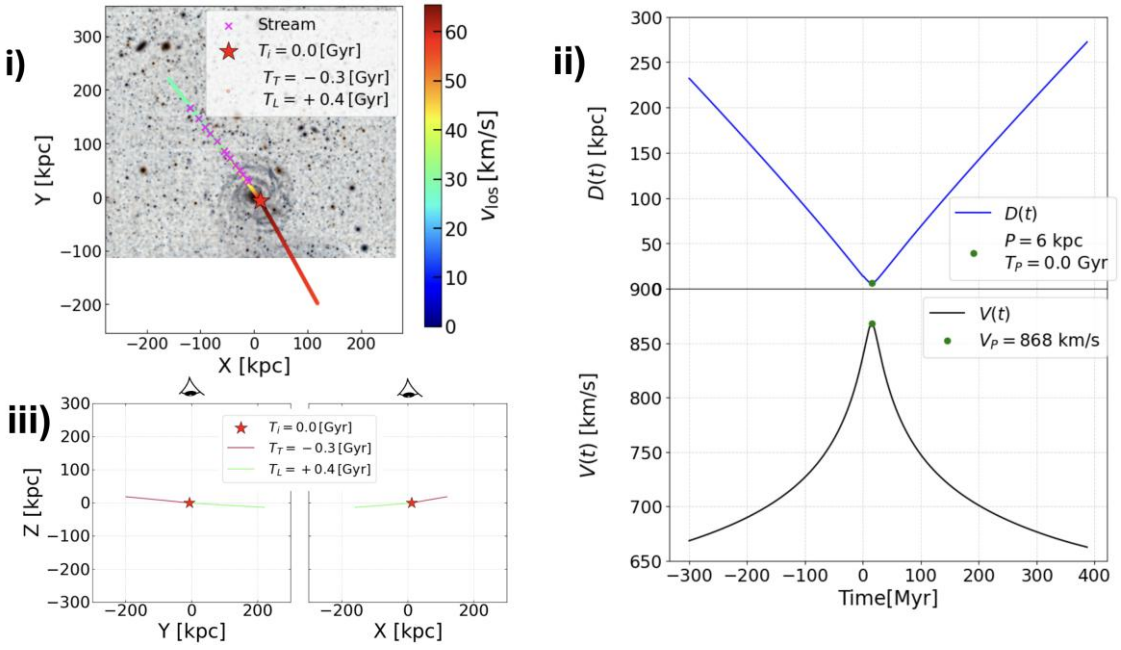


- Scenario III-a: M1B + sB.

  A possible orbit and its analysis are detailed in the three panels in Fig. 8. Panel i) An orbit integration for $[-0.3,0.4]$ Gyr highlighting a possible trajectory of M1B (red star) accompanied by a leading stellar stream (magenta crosses) in the first passage. The colour bar denotes LoS velocities that reach $\Delta V_{\mathrm{LoS}} \approx 60$ km/s. Panel ii) The distance versus time plot outlines the orbital movement of the satellite. Pericenter value ~ 6 kpc and a velocity magnitude of approximately $|V| \sim 868$ km/s at ~ 0.01 Gyr. Panel iii) Y-Z and X-Z planes of the orbit. For the corner plots (not displayed) the optimal parameters are $z \sim -33$ kpc, $v_t \sim 998$ km/s, PA$\sim 36°$, with orbital characteristics that include a periapsis around $R_{\mathrm{peri}} \sim 35$ kpc, an apoapsis of $R_{\mathrm{apo}} \sim 9649$ kpc, and an ellipticity $\epsilon \sim 0.88$. The legend shows the times for the progenitor, leading, and trailing components of the stream.

Figura 8: Scenario III-a: M1B+sB. Panel i) An example of an orbit integrated over [−0.3, 0.4] Gyr show not only a possible association of the sB as the leading component shown

by magenta crosses with M1B represented by a red star as the progenitor. It is superimposed on the optical image of Malin 1 and its surroundings (Galaz et al. 2015). The color-bar illustrates LoS velocities along the orbit, having a maximum difference of ΔVLoS ≈ 60 km/s. Legend shows stellar stream mark, the time for the progenitor (M1B), denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) times with a common dot for both showing the colour or velocity of M1B at that specific moment of the orbit. The NFW profile was employed for this solution. Panel ii) Distance vs time, and a magnitude velocity vs time with |V| ≈ 868 km/s. In this orbit, the pericenter passage of M1B occurred approximately 0.01 Gyr. Panel iii) X-Z and Y-Z orbital planes. The best orbit has z ~ −33 kpc, vt ~ 998 km/s, PA~ 36°, Rperi ~ 35 kpc, Rapo ~ 9649 kpc, and ϵ ~ 0.88. The observer would be located at the top of these subpanel, at postitive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Legend shows the time for the progenitor, Ti = 0.0 Gyr (present), and the Trailing, in purple colour, (TT = −0.3 Gyr) and the Leading, in light green colour, (TL = 0.4 Gyr).



- Scenario III-b: M1B + sB + sA.

  This situation seeks M1B as the progenitor of sB and sA simultaneously, that is, as the leading and trailing streams with M1B at the core as the main progenitor. The

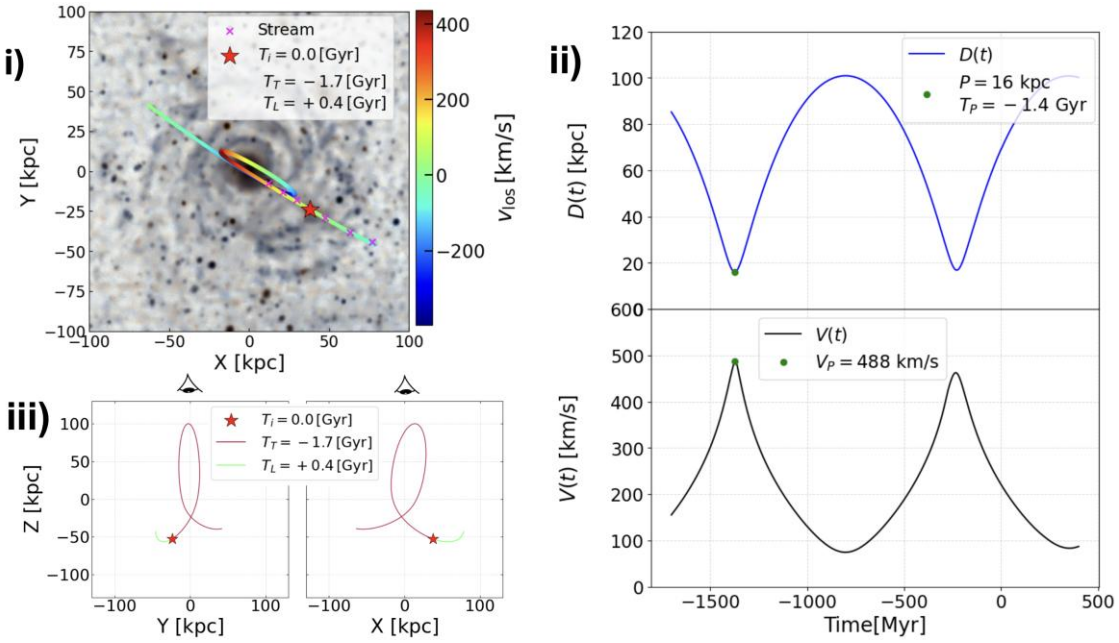
pericentric passage is 32 kpc with a velocity of ~ 706 km/s which happened 20. Myr ago. However, it was not possible to find a fitting orbit that connects both streams. Moreover, only an unbound orbit was the best solution. It is shown in panel ii) Fig. B.1.

- Scenario IV-a: M1A + sA.

  Within the Malin 1 environment plot from (Galaz et al. 2015), Fig. 9 illustrates a best-fitted orbit that has been overemphasised. Three panels are used to describe this orbit. Panel i) An orbit simulation covering the time span $[-1.7,0.4]$ Gyr captures the visual aspects of Malin 1, identifying the possible trajectory for M1A (represented as a red star) along with a leading and trailing stellar stream (indicated by magenta crosses) as pointed out by (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012). The colour bar indicates LoS velocities, which can reach $\Delta V_{\mathrm{LoS}} \approx 700$ km/s. Panel ii) A graph plotting the distance against time demonstrates the satellite's orbit, highlighting a pericenter around ~ 16 kpc with a velocity magnitude of approximately $|V| \sim 488$ km/s at ~ 1.3 Gyr ago in the first passage. Panel iii) The orbit is shown in both the X-Z and Y-Z planes. In the accompanying corner plots (not shown here), the best fit parameters are $z \sim -138$ kpc, $v_t \sim 312$ km/s, PA$\sim 240°$. The orbit properties include a periapsis of about $R_{\mathrm{peri}} \sim 112$ kpc, an apoapsis of $R_{\mathrm{apo}} \sim 246$ kpc and an ellipticity $\epsilon \sim 0.08$, which illustrates the eccentricity and scale of the orbit.

Figura 9: Scenario IV-a: M1A + sA. Panel i) A possible orbit integrated [–1.7, 0.4] Gyr over the optical image of Malin 1 and its environment (Galaz et al. 2015), revealing possible paths of M1A (red star) and a leading and trailing stellar stream arms (magenta crosses). The color bar represents LoS velocities reaching ΔVLoS ≈ 700 km/s. This could be that both components of sA shows the trailing and leading stream components with M1A as the progenitor. Legend shows stellar stream mark, the time for the progenitor (M1A), denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) times with a common dot for both

showing the colour or velocity of M1C at that specific moment of the orbit. The isothermal profile was employed for the dark matter. Panel ii) The distance versus time graph illustrates the satellite's orbital path, showing a pericenter near ~ 16 kpc with a velocity magnitude around |V| ~ 488 km/s, at ~ 1.4 Gyr ago in their first passage. Panel iii) X-Z and Y-Z orbital planes. The best orbit has z ~ −138 kpc, vt ~ 312 km/s, PA~ 240°, Rperi ~ 112 kpc, an apoapsis at Rapo ~ 246 kpc, and an ellipticity ϵ ~ 0.08. The observer would be located at the top of these subpanels, at postitive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Legend shows the time for the progenitor, Ti = 0.0 Gyr (present), and the Trailing, in purple colour, (TT = −1.7 Gyr) and the Leading, in light green colour, (TL = 0.4 Gyr).



- Scenario IV-b: M1A + sA + sB.

  In this scenario, M1A is identified as the origin of both sB and sA, acting as the foundational structure for the leading and trailing streams, with M1A located in the centre as the principal progenitor. However, an orbit linking the two streams could not be determined. The pericentric passage is 132 kpc with a velocity of ~ 553 km/s which happened 1.1 Gyr ago. However, it was not possible to find a

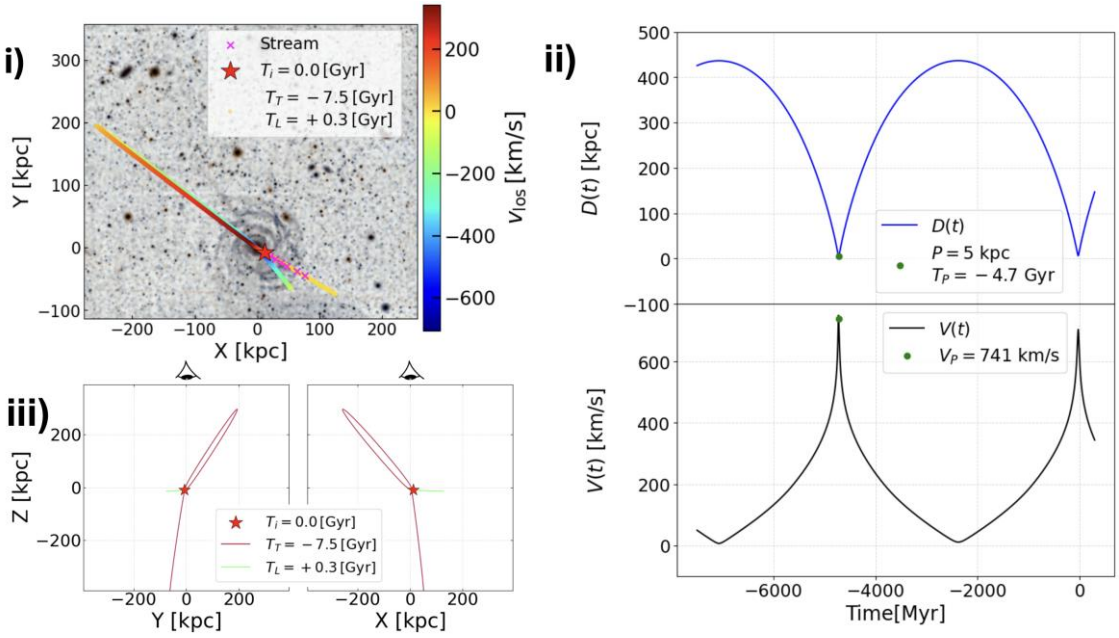
fitting orbit that connects both streams. Moreover, only an unbound orbit was the best solution. It is shown in panel iii) Fig. B.1

- Scenario V-a: sA.

  The hypothesis is that the progenitor of sA has been completely tidally disrupted by the strong potential gravitational forces of Malin 1, leaving only sA as the remnant (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). To investigate this, orbital computations were performed using leading and trailing integration. In Fig. 10, three panels are shown. Panel i) An integrated orbit over the time span $[-7.5,0.3]$ Gyr is showcased overlaying the optical image of Malin 1 (Galaz et al. 2015). This demonstrates the possible disintegration of the progenitor of sA (indicated by magenta crosses), with the last likely association point in sA marked by a red star. The colour bar indicates LoS velocities up to $\Delta V_{\mathrm{LoS}} \sim 800$ km/s. Panel ii) The distance versus time graph reflects the dynamics of the satellite's orbit, showing the minimum distance (pericenter) at ~ 4.7 kpc and a velocity magnitude of $D \sim 741$ km/s, at ~ 4.7 Gyr ago. Panel iii) Orbit views include X-Z and Y-Z planes. The best orbit has $z \sim -5.4$ kpc, $v_t \sim 590$ km/s, PA$\sim 240°$, with orbital flat sample parameters of $R_{\mathrm{peri}} \sim 13$ kpc, $R_{\mathrm{apo}} \sim 250$ kpc and $\epsilon \sim 0.57$. The extremely small pericentres reveal that complete tidal disruption would be possible. It is interesting to note that M1A is in the debris of sA.

Figura 10: Scenario V-a: sA. The progenitor of sA has been completely tidally disrupted by the strong potential gravitational of Malin 1, leaving only sA as the remnant (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). Panel i) A possible orbit spanning [−7.5, 0.5] Gyr maps the visual features of Malin 1, revealing possible path of a destroyed progenitor (red star) and a leading stellar stream sA (magenta crosses). The destroyed progenitor three dimensional position has been choose with the same M1B, x and y position, but z = 0.1 kpc (diferent of z = −43 kpc found in scenario IIIa). The color bar represents LoS velocities reaching ΔVLoS ≈ 700 km/s. In this destroyed situation sA could shows debris

of the destroyed progenitor. Legend shows stellar stream mark, the time for the destroyed progenitor, denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) times with a common dot for both showing the colour or velocity of the progenitor at that specific moment of the orbit. The isothermal profile was employed for the dark matter. Panel ii) The distance versus time graph illustrates the satellite's orbital path, showing a pericenter near ~ 4.7 kpc with a velocity magnitude around |V| ~ 741 km/s, at ~ 4.7 Gyr ago. Panel iii) The orbit is depicted in the X-Z and Y-Z planes. The best-fit parameters are z ~ −5.41 kpc, vt ~ 590 km/s, PA~ 240◦, with the orbit's characteristics including a periapsis at about Rperi ~ 13 kpc, an apoapsis at Rapo ~ 250 kpc, and an ellipticity ϵ ~ 0.57. The observer would be located at the top of these subpanel, at postitive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Notoriously, M1A belongs to sA. Legend shows the time for the progenitor, Ti = 0.0 Gyr (present), and the Trailing, in purple colour, (TT = −7.5 Gyr) and the Leading, in light green colour, (TL = 0.3 Gyr).



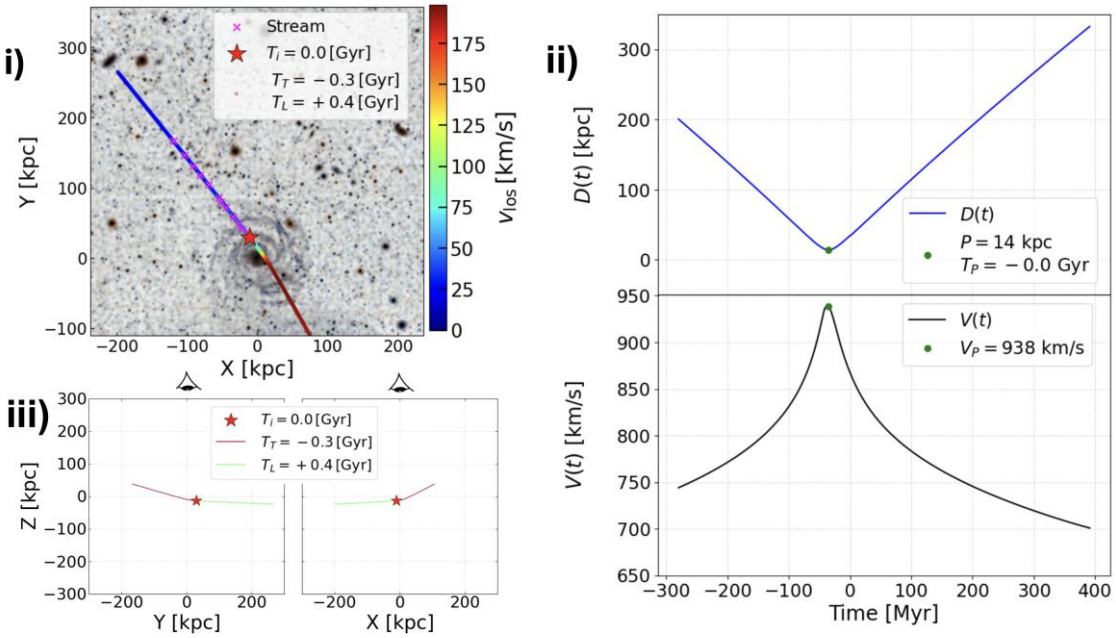
- Scenario V-b: sB.

  In this final scenario again, the possibility of a destruction event is examined. The hypothesis is that the progenitor sB has been completely tidally disrupted, leaving only sB as the remnant (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). To

investigate this, orbital computations were performed using leading and trailing integration. In Fig. 11, three panels are shown. Panel i) An integrated orbit over the time span $[-0.3,0.4]$ Gyr is showcased overlaying the optical image of the Malin 1 system (Galaz et al. 2015). This demonstrates the disintegration of the progenitor of sB (indicated by magenta crosses), with the last likely association with sB marked by a red star. The colour bar indicates LoS velocities up to $\Delta V_{\mathrm{LoS}} \sim 175$ km/s. Panel ii) The distance versus time graph reflects the dynamics of the satellite's orbit, showing the minimum distance (pericenter) at ~ 14.06 kpc and a velocity magnitude of $D \sim 938$ km/s happened 35 Myr ago. Panel iii) Orbit views include X-Z and Y-Z planes. For the corner plots (not displayed), the top fitting parameters at the 50/100 percentile are $z \sim -7$ kpc, $v_t \sim 710$ km/s, PA$\sim 37°$, with the orbital flat sample parameters being $R_{\mathrm{peri}} \sim 10$ kpc, $R_{\mathrm{apo}} \sim 3046$ kpc and $\epsilon \sim 0.88$. Interestingly, sB points to eM1.

Figura 11: Scenario V-b: sB. The progenitor of sB has been completely tidally disrupted, leaving only sB as the remnant (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). Panel i) A possible orbit over the time span [−0.3, 0.4] Gyr is showcased overlaying the optical image of Malin 1 and its vicinity (Galaz et al. 2015). This demonstrates the disintegration of the progenitor (indicated by magenta crosses). The destroyed progenitor three-dimensional position has been chosen with the same first sB point x and y position, and z = Rtani = −24 kpc. The colour bar indicates LoS velocities up to ΔVLoS ∼ 175 km/s. In this new destroyed situation sA could it be debris of thr destroyed progenitor. Legend shows stellar stream mark, the time for the destroyed progenitor, denoted (Ti), and the Trailing (TT) and Leading (TL) times with a common dot for both showing the colour or velocity of the progenitor at that specific moment of the orbit. The isothermal profile was employed for the dark matter. Panel ii) The distance versus time graph reflects the dynamics of the satellite's orbit, showing the minimum distance (pericenter) at D ∼ 14 kpc and a velocity magnitude of ∼ 938 km/s. Panel iii) Orbit views include X-Z and Y-Z

planes. Panel iii) X-Z and Y-Z orbital planes. The best fitting parameters are z ~ −7 kpc, vt ~ 710 km/s, PA~ 37°. The model with the maximum likelihood has orbital parameters Rperi ~ 10 kpc, Rapo ~ 3046 kpc, and ϵ ~ 0.88. The observer would be located at the top of these subpanels, at positive Z and X, Y = (0, 0) kpc is the Malin 1 center. Legend shows the time for the progenitor, Ti = 0.0 Gyr (present), and the Trailing, in purple colour, (TT = −0.3 Gyr) and the Leading, in light green colour, (TL = 0.4 Gyr). It is notorious that sB points to eM1



4.3 Physical parameters

In addition, the determination of key physical parameters, such as the total length covered for the orbital solutions in Scenario I-a-radial and I-a-polar between the pericenter and the satellite eM1. The specific angular momentum for Malin 1 (j_*) (Di Teodoro et al. 2023), and the ratio j_*/j_{200}, where j_{200} is j_* within the virial ratio (Pérez-Montaño et al. 2022). The stellar mass-to-light ratio for each dark mater profile. The total luminosity in the R band (following (Mo 2010)). The total stellar mass using the pseudo-isothermal profile and the virial radius and virial mass, provides essential constraints on the mass distribution and dynamics of the system. This result can be seen in Table 5. Our

results suggest that Malin 1 adheres to the Fall relation, which supports the notion that giant low surface brightness galaxies (gLSBGs) might evolve differently from high-surface brightness spirals, aligning instead with other gLSBGs. Furthermore, Malin 1 possesses a greater specific angular momentum compared to the Milky Way, largely due to its vast size (refer to Section 5).

Table 5: Physical results from the Models. Specific Angular Momentum (j_*), and j_{200} is j_* at virial radius (Pérez-Montaño et al. 2022). Mass to Light ratio using the NFW model and the Isothermal one. Total luminosity in the R band. Stellar mass using the NFW model. Stellar mass using the Isothermal model. Virial Mass. Dynamical masses. Length of the orbital solution between the pericenter and the satellite eM1 for the radial and polar solutions in scenario I-a.

Parameter	Value
j_*/j_{200}	0.21 [a]
$(\mathrm{M}/L_R)_{NFW}$	$3.2 \pm 0.5\ \mathrm{M}_\odot/\mathrm{L}_\odot$ [b]
$(\mathrm{M}/L_R)_{ISO}$	$3.4 \pm 0.5\ \mathrm{M}_\odot/\mathrm{L}_\odot$ [b]
$\mathrm{L}_{R,Total}$	$1.9 \pm 0.6 \times 10^{11}\ \mathrm{L}_\odot$ [c]
$\mathrm{M}_{Stellar,NFW}$	$2.3 \pm 1 \times 10^{11}\ \mathrm{M}_\odot$ [d]
$\mathrm{M}_{Stellar,ISO}$	$4.8 \pm 1 \times 10^{11}\ \mathrm{M}_\odot$ [d]
$R_{Virial-NFW}$	247 kpc [e]
$R_{Virial-Iso}$	323 kpc [e]
$M_{Dyn-NFW}$	$1.7 \times 10^{12}\ \mathrm{M}_\odot$ [f]
$M_{Dyn-Iso}$	$3.8 \times 10^{12}\ \mathrm{M}_\odot$ [f]
$l_{Malin1-radial}$	480 kpc [g]
$l_{Malin1-polar}$	738 kpc [g]

[a] j_*/j_{200} ratio for Malin 1, reported in (see Fig. 7 in Pérez-Montaño et al.; 2022). [b] M/L represent the stellar mass-to-light ratio, obtained in the R-band surface brightness profile (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010), using NFW and pseudo-Isothermal dark halo profiles. The resuls obtained are in concordance with Lelli, Fraternali, and Sancisi (2010). [c] Total luminosity obtained in the R-band. [d] Total stellar mass obtained using the

Isothermal profile, half the value reported by Saha et al. (2021) [e] Virial radius obtained using NFW and Isothermal profiles as in Mo (2010). [f] Total mass inside the Virial radio for NFW and Isothermal profiles as in Mo (2010). [g] The radial length is less than the polar one as it must be. The last describes a solution like the discovery by Martínez-Delgado et al. (2021).

5. Discussion

The Malin 1 system, which includes four satellites and two stellar streams, was analysed to identify possible historical interactions for each satellite and possible alignment with the streams. Various orbital scenarios linking Malin 1, the stellar streams and their satellites are depicted in Fig. 5 – Fig. 11. It was observed that each satellite's line-of-sight distance from Malin 1 varies based on the specific scenario considered, as elaborated further in the discussion. Our findings suggest that the streams may be trailing, leading, or both. Future kinematic measurements of the streams could provide insights into their orbital history.

The Malin 1 system exhibits a dynamical configuration, characterised by two significant possible streams, sA and sB, as well as at least four satellite galaxies, M1A, M1B, M1C and eM1. Of these, M1B and eM1 have been reported as satellites by Reshetnikov, Moiseev, and Sotnikova (2010), M1B is close to the centre, while eM1 is at 350 kpc in the northeast. M1A and M1B are also reported as compact ellipticals (cE) (Saburova and Cherepashchuk 2021), likely resulting from the tidal stripping of massive progenitors (Saburova et al. 2023). Similar processes were observed in other galaxies, such as UGC 1382 (Saburova and Cherepashchuk 2021). M1C could be an UDG (Ji et al. 2021). However, some authors claim M1C as a young star-forming region of ~ 3 arcsec of apparent radius, consistent with point 41 of Fig. 3 of Junais et al. (2024), showing Hα emission (Junais et al. 2024, and private communication). If the last Hα emission region is confirmed, then Scenario II-a and II-b could be rejected as the search for the stream progenitors.

Using a NFW dark mater model and a pseudoisothermal model, it was observed that for our solutions, bound orbits were achieved with most likelihood with the isothermal profile. This outcome arises because the isothermal profile predicts a larger mass distribution at greater distances, offering a better fit to the experimental data, as illustrated in the bottom panel in Fig. 2.

Other studies show a possible connection between the cE and their parent spiral galaxy, such as M32 and the Andromeda galaxy stream (Ibata et al. 2004; Fardal et al. 2006). This evidence supports the hypothesis that the cEs, M1A, M1B, and likely M1C could also be identified as progenitors of streams A and B. Similar conclusions have been derived for other galaxies. For example, a giant galactic tail reported to have a value greater than 350 kpc and called "Kite" (Zaritsky et al. 2023) or the giant stream of ~ 500 kpc generated by a dwarf galaxy in the Coma cluster (Román et al. 2023) supports the existence of large streams, for example, stream B, which connects linearly in projection, eM1, with Malin 1. If the off-centre detected in eM1 (Fig. 1 – point 4) indicates ongoing star formation, it could suggest that gas inflows or disturbances have initiated star formation away from the centre. This could be due to a possible interaction or merging event, where tidal forces have displaced the galaxy's core. Such phenomena are often observed in galaxies that undergo gravitational interactions, resulting in an off-centre core or an asymmetric disk (Mao et al. 2021).

The connection of our orbital solutions with possible progenitors and streams aligns well with survey observations, such as those noted by Zaritsky et al. (2023; Román et al. 2023). As demonstrated by Zhu et al. (2018), the simulation of the formation of a Malin 1-like galaxy involves the stimulated accretion due to cooling of a hot halo gas, caused by the merger of two satellite galaxies (intruders), leading to the creation of a large galactic disk at $z = 0$.

Martínez-Delgado et al. (2021) suggest that examining the formation of tidal streams could provide insight into the timing of major merger events. In the case of Malin 1, some or all satellites could contribute via wet mergers with the size of the main galaxy. The pericenters pass at ~ -1.3 Gyr, for scenario I-a-radial (eM1+sB-radial), ~ -1.3 Gyr, for scenario I-a-polar (eM1+sB-polar), the trailing pericenter passage occurred approximately -0.1 Gyr ago, whereas it was about 2.3 Gyr for the leading arm in scenario II-b (M1C+sA+sB), -4.2 Gyr, for scenario III-a (M1B+sB), -1.3 Gyr, for scenario IV-a (MA1+sA), -4.7 Gyr, for scenario V-a (sA only) and -0.04 Gyr, for scenario V-b (sB only). It could be proposed that the evolution of Malin 1 likely involved a significant wet major merger approximately 1.3 Gyr ago, influenced by the eM1 passage. In addition, M1B contributes 4.3 Gyr ago, M1A -1.3 Gyr ago, and M1C with the leading stream 2.3 Gyr and -0.1 Gyr for the trailing component (Martínez-Delgado et al. 2021).

In Scenario I-a-r: eM1 + sB, radial orbit, seeing in Fig. 5 , the pericenter passage of eM1 occurred $\sim$ 1.3 Gyr ago (z $\approx$ 0.1). In addition, eM1 shows evidence of emission lines of Hα, Hβ, and OII, so it is a star-forming disk galaxy (SDSS SkyServer 2024; Lintott et al. 2011). The movement of eM1 started in our analysis $\sim$ 13 Gyr ago ($z \approx 6.8$), and the pericenter passage $z \approx 6.8$ so their evolution would help increase the gas in Malin 1 placing eM1 as another candidate progenitor of sB.

Scenario I-a-p: eM1 + sB, polar orbit. This approach could help model stellar streams in circular orbits, such as the one of the sombrero galaxy (Martínez-Delgado et al. 2021), the satellite galaxy could be eM1 in a polar orbit, as appreciated in panel iii) Fig. 6.
An interesting situation is Scenario I-b: eM1 + sA + sB, which attempts to connect both streams; however, it was not possible to find a bound orbit. The best unbound is shown in panel i) in Fig. B.1. The same unbound situation repeats in Scenario III-b, and Scenario IV-b, as shown in panels ii) and iii) in Fig. B.1 respectively.

In Scenario II-a, M1C + sB presents strong support for the hypothesis that M1C, potentially an Ultra Diffuse Galaxy (UDG) (Ji et al. 2021), serves as proof that sB has leading and trailing sections, in line with what Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans (2012) proposed by identifying M1C as the progenitor. This scenario is illustrated in panel iv) of Fig. B.1. In contrast, adding sA as a stream linked to sB with M1C as the source for both streams, that is, scenario II-b: M1C + sA + sB, offers a compelling solution that not only unites both streams, but also reenacts Scenario II-a. This solution is depicted in Fig. 7. It is notorious how all orbits show us the radial behaviour and intriguing connection of leading and trailing components of the large stream.

Scenario III-a examines M1B + sB, involving a pericenter passage ~ 0.01 Gyr, as illustrated in Fig. 8. This scenario is also recognized by Zhu et al. (2018) as a potential intruder galaxy due to the ancient interaction that possibly contributes to stimulated accretion. Currently, stream B functions as the leading arm with M1B as its progenitor, and the trailing segment also exhibits radial behaviour.

M1A + sA, or scenario IV-a, is a innovative configuration, M1A being the other cE as the core or leading and trailing components of sA. In this arrangement, the pericenter is $\sim 16.1 \pm 1.2$ kpc, which confirms that M1A is another possible cause of triggering regions of star formation in the central part of the galaxy as reported by (Lelli, Fraternali, and Sancisi 2010).
In the last scenario (IV-a) it was also interesting to find polar orbits (not shown), so sA could be a tidal tail perpendicular to the orbit.

Finally, scenarios V-a: sA and V-b: sB are novel configurations because they explore a possible tidal disruption of the progenitor (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). For both, radial orbits (low circularity) were founded, which could mean that the streams formed very recently (Panithanpaisal et al. 2021). Scenario V-a shows us a total

disconnect from sB, which is interesting per se as an independent event. Moreover, it is connected with M1A which reinforces the possibility that sA is strong evidence of some past interaction between M1 and a destroyed progenitor that also connects M1A. Scenario V-b is also remarkable because it does not connect sB with sA and plays in that way an equivalent situation where the possible progenitor was destroyed and we can see only debris from it in sB. Furthermore, M1C could be a region of star formation activated by this passage, as a discovery of Junais et al. (2024).

Our orbital analysis presents favorable results for all satellites M1B, M1A, M1C, and eM1. Moreover, for destroyed ones, as the last two scenarios analyzed (V-a and V-b).

In the past, if the satellites M1A, M1B, and M1C contained more gas, they could have triggered stimulated accretion around approximately ~ -4.7, ~ 4.2, and ~ -2.3 billion years ago, respectively, which could have contributed to the considerable size of Malin 1 (Zhu et al. 2018).

Another compelling point supporting the possibility that eM1 aligns with Malin 1 is that aligned mergers in relatively isolated environments may facilitate the development of expansive discs, similar to Malin 1's galaxy, with no ongoing mergers currently (Zhu et al. 2023).

Pérez-Montaño et al. (2022) have further observed that LSBGs exhibit a greater connection between their specific angular momentum and dark matter compared to HSBGs. Our result, reported in Table 4, is consistent with that study. The ratio of specific angular momentum to the angular momentum in the virial radius, denoted as j_*/j_{200}, places Malin 1 in line with the Fall relation suggested by Fall (1983). This result agrees with the findings illustrated in Pérez-Montaño et al. (2022, fig. 7,). This evidence highlights Malin 1 as a galaxy that exhibits significant specific angular momentum (Di Teodoro et al. 2023; Pérez-Montaño et al. 2022). The specific angular momentum found still has a larger one than the Milky Way, primarily because of its enormous size. This

suggests that Malin 1 is a key system for understanding the formation and angular-momentum evolution of these gLSBG. (Aditya et al. 2023, private communications with Aditya.). Furthermore, the substantial specific angular momentum of Malin 1 could indicate past interactions that resulted in the accretion of some satellites by the giant LSB galaxy (Zhu et al. 2018).

The warp and cavity observed in Malin 1 could result from gravitational interactions with nearby and distant satellites. For example, orbital solutions from Scenarios II-b (M1C+sA+sB) and III-a (M1B+sB) show trajectories near the cavity, suggesting that gravitational forces combined with Malin 1's rotation influence its development. The last pericenter passage of M1C (scenario II-b) was ~ 0.1 Gyr ago, which is consistent with some warped models (Binney 2024). Also, a flyby of eM1 with pericenter pass 1.3 Gyr ago may help explain the HI disk warp. Interactions between galaxies are the main responsible for warped disk (Kalberla and Kerp 2009; J. H. Kim et al. 2014).

One of the constraints of our study comes from the lack of extensive data. This limitation is especially significant s the intricate spatial configuration of the streams. It also applies to their velocity patterns at various locations. Future research should aim to investigate other elements of the streams. These may include components that might have been overlooked. Conducting a specialised kinematic survey of the Malin 1 system entails assessing the velocities of various constituents within and surrounding this giant Low-Surface Brightness (LSB) galaxy, such as its stellar and gaseous components and satellite galaxies.

N-body simulations should serve as the next stage in our investigation to predict specific scenarios. This technique will clarify the connections between streams and the initiation of satellites. Furthermore, it will validate our orbital solutions within the Malin 1 system. An additional significant approach for future research might involve investigating a three-body or three-galaxy system, designating the heaviest galaxies as M1 and eM1,

while the third, smaller one might be chosen from among M1B, M1A, or M1C, to further elucidate the presence of giant stellar streams (Zaritsky et al. 2023).

6. Conclussions and future work

We explored the orbital dynamics of the satellite galaxies surrounding Malin 1 and their connection to stellar streams. By utilizing HI and R-band data, we developed gravitational potential models that include stellar, gaseous, and dark matter elements. Through Monte Carlo Markov Chain (MCMC) simulations, we analyzed their trajectories within both the Navarro-Frenk-White and isothermal-halo frameworks. Our results emphasize the influence of historical interactions on the development of the Malin 1 extended disk and the increase in its gas abundance. The core results of this research are outlined below.

The Malin 1 system revealed two giant stellar stream candidates, sA and sB, and four satellite galaxy candidates: M1A, M1B, M1C, and eM1.

Orbital simulations emphasized the crucial importance of the dark matter halo, revealing that massive halos provide improved models for the gravitationally bound paths of satellites. Our models suggest orbital solutions that may link M1A and M1B, classified as compact ellipticals (cE), to the stellar streams. This possible link aligns with the formation theories for cE galaxies that undergo significant tidal stripping, similar to the interaction between M31 and M32 (Ibata et al. 2004).

The nature of M1C is still not clearly defined. Its Hα emission and structure imply that it may be an Hα blob, as suggested by Ji et al. (2021), within the scope of ultradiffuse galaxies (UDG). However, evidence of stellar emissions also suggests that M1C might be either a substantial nuclear star cluster (Antonini 2013) or a blob forming stars (Junais et al. 2024, private communication). More studies are essential to determine its actual identity.

M1C is in the centre of stream sB. We identified orbits that can link M1C with the leading and trailing components of the stream, which exhibit approximate symmetry (Niederste-Ostholt, Belokurov, and Evans 2012). Studies indicate that tidal stripping could be responsible for the creation of cE galaxies such as M1A and M1B (Chilingarian et al. 2015). In Scenario IV-a (M1A+sA), orbital configurations unite the two cE galaxies, while Scenario II-b (M1C+sA+sB) associates the streams with the cE galaxies, identifying the core of sB as M1C.

Satellite destruction creates debris streams, as shown in scenarios V-a and V-b, highlighting gravitational potential interactions. In particular, in scenario V-b, sB is directed toward the eM1 position (Deason et al. 2023; Panithanpaisal et al. 2021). Moreover, small pericentres would lead to strong tidal stripping, for example, 4.7 kpc for scenario V-a (sA only) or 14.0 kpc for scenario V-b (sB only). Satellites in close pericentric encounters have been shown to enhance star formation (Saha et al. 2021), as is similarly observed in scenarios III-a (M1B + sB) and IV-a (M1A + sA) interactions.

The most probable scenario for the formation of the two streams could be Scenario II-b (M1C + sA + sB). To explain sB as a radial connection between eM1 and M1, scenario I-a radial orbit (eM1 + sB - radial) and a polar orbit with eM1 as progenitor and sB not in the galactic plane, scenario I-a polar (eM1 + sB - polar). To explain sB as the leading component of M1B, scenario III-a (M1B + sB) and to study the leading and trailing components with M1A as progenitor, scenario IV-a (M1A + sA). For the destruction process involves scenarios V-a (sA) and V-b (sB).

The ratio of the specific angular momentum to that in the virial radius, j_*/j_{200}, aligns Malin 1 in agreement with the Fall relation as proposed by Fall (1983). This value is consistent with the results presented in Pérez-Montaño et al. (2022, fig. 7). This observation underscores Malin 1 as a galaxy with a high specific angular momentum (Di

Teodoro et al. 2023; Pérez-Montaño et al. 2022) and could play a crucial role in future comparative studies with other gLSBGs.

Future photometric and spectroscopic studies may reveal a wide parameter space information, which will help to improve the connection between observations and semi-analytical models.

More detailed photometric studies are essential to uncover the complete range and complex details of the stellar streams surrounding Malin 1. These studies have the potential to identify previously unnoticed streams and provide insight into their orientation, composition, and relationships with satellite encounters. This information would greatly improve our comprehension of the system's dynamic history and its significance in models of galaxy formation. For example, upcoming MUSE data for the entire Malin 1 disk (Galaz et al. in preparation) will help refine our models by incorporating information on HII regions and metallicities throughout the disc, whereas JWST data will soon investigate the Kennicutt relation (Berg et al. 2024).

N-body simulations are set to predict scenarios within the Malin 1 system and will investigate mergers occurring at high redshift and the tidal disturbance of stellar streams by satellites. These efforts aim to elucidate the mechanisms behind stream-satellite interactions and to examine the semi-analytical solutions applied in our research. These simulations are set to investigate the development and stability of the warp in the disk of Malin 1, possibly caused by internal dynamics (Saha, Tseng, and Taam 2010) or interactions with its satellites (Bonaca et al. 2021). Understanding the origin of the streams is vital to uncovering the impact of satellites and tidal forces on the distinctive shape of the galaxy system. Furthermore, this work seeks to shed light on the mechanics of stream-satellite interactions and to assess the semianalytical models used in our study.

Given these considerations, it is essential to rapidly examine new satellite candidates, such as the three galaxies with roughly the same redshift situated about 1 Mpc from Malin 1 (Bustos et al. in prep.).

Taken together, this research efforts offer an essential comparative framework for understanding the development of gLSBGs systems like Malin 1. This framework includes a detailed analysis of critical components such as optimal orbital solutions, satellite angular momentum, and stellar stream dynamics, as investigated in studies by (Zhu et al. 2018; Mapelli et al. 2008; Di Teodoro et al. 2023). These studies emphasise the significance of satellite interactions, mergers, and streams as indicators of past interactions, extended disks, and gas enrichment within these galaxies, aligning with the current models of galaxy formation (This is the end).

Acknowledgments

This paper is part of a Ph.D. thesis work, supported by Carrera de Física, Instituto de Investigaciones Físicas, Facultad de Ciencias Puras y Naturales, Universidad Mayor de San Andrés (UMSA) in La Paz, Bolivia, the ANID BASAL project CATA FB210003 and Pontificia Universidad Católica de Chile (PUC). RBE extends gratitude for the access to the Horus and Geryon 2 PUC servers. Thanks, are also due to the Organisation of American States (OAS) for the 2021-2022 scholarship, and to the Sociedad Chilena de Astronomía (SOCHIAS) for two grants under the Prof. Adelina Gutiérrez programme. Furthermore, RBE is also grateful to the Indian Institute of Astrophysics for a six-month visit including the Vainu-Bappu Observatory finishing 2024 and early 2025. MD and SB acknowledge the support of the Science and Engineering Research Board (SERB) Core Research Grant CRG/2022/004531 and the Department of Science and Technology (DST) grant DST/WIDUSHI-A/PM/2023/25(G) for this research. RBE, GG and MB acknowledge the support of European Southern Observatory (ESO) for providing space for discussions, while this paper was written. GG thanks Pontificia Universidad Católica de Chile, ESO,

France-Chile Laboratory of Astronomy (FCLA), and Laboratoire d'Astrophysique de Marseille (LAM) for their support during a 2024-2025 sabbatical leave. J. is funded by the European Union (MSCA EDUCADO, GA 101119830 and WIDERA ExGal-Twin, GA 101158446). This research has used the NASA/IPAC Extragalactic Database (NED), which is operated by the Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, under contract with the National Aeronautics and Space Administration. This research has made use of NASA's Astrophysics Data System Bibliographic Services.

Appendix A: Stream Points

Table A.1: presents the Stream Points, i.e., Points obtained as prior information for the Monte Carlo Markov chain mcmc-emcee method (Foreman-Mackey et al. 2012) using visual observation on the Fig. 1 (Galaz et al. 2015).

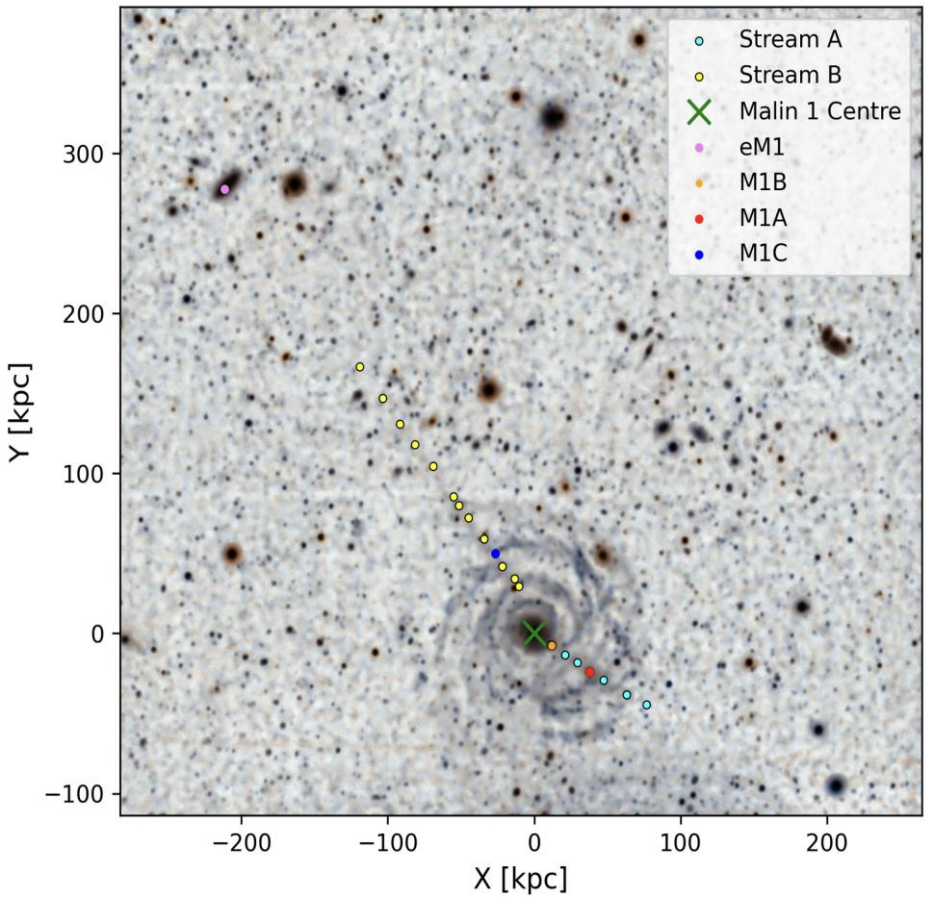


Figura A.1: Stream points, sA (cyan points), and sB (yellow points). and four satellites, M1A (red), M1B (orange), M1C (blue), and eM1 (violet). Malin 1 center is mark with a cross (green). Data values are show in Table A.1.

Table A.1: Stream Points sA (7 points) and sB (13 points). They are observational Points used as inputs in the Markov chain Monte Carlo technique mcmc-emcee (Foreman-Mackey et al. 2012). The four (4) satellites positions are included. The statistical accuracy of each coordinate x and y was enhanced by using the projected angular scale and the

median seeing of 0.8 arcsec (Galaz et al. 2015), given a confidence level of ±1 kpc. For the radial distance a propagation error was used.

Object	α (2000)	δ (2000)	x [kpc]	y [kpc]	z [kpc]
Malin 1	12:36:59.36	14:19:49.4	0 ± 1	0 ± 1	0
sA1: M1B	12:36:58.89	14:19:43.9	12 ± 1	-8 ± 1	14 ± 1
sA2	12:36:58.42	14:19:39.4	21 ± 1	-13 ± 1	25 ± 1
sA3	12:36:58.03	14:19:36.1	30 ± 1	-18 ± 1	35 ± 1
sA4: M1A	12:36:57.62	14:19:32.9	38 ± 1	-24 ± 1	45 ± 1
sA5	12:36:57.12	14:19:28.2	47 ± 1	-29 ± 1	56 ± 1
sA6	12:36:56.78	14:19:26.8	63 ± 1	-38 ± 1	74 ± 1
sA7	12:36:56.47	14:19:24.9	77 ± 1	-44 ± 1	89 ± 1
sB1	12:36:59.98	14:20:07.1	-11 ± 1	29 ± 1	31 ± 1
sB2	12:37:00.02	14:20:12.1	-13 ± 1	34 ± 1	37 ± 1
sB3: M1C	12:37:00.36	14:20:16.8	-22 ± 1	42 ± 1	47 ± 1
sB4	12:37:00.65	14:20:22.6	-27 ± 1	50 ± 1	57 ± 1
sB5	12:37:01.03	14:20:27.6	-34 ± 1	59 ± 1	69 ± 1
sB6	12:37:01.34	14:20:34.4	-45 ± 1	72 ± 1	85 ± 1
sB7	12:37:01.68	14:20:41.3	-52 ± 1	80 ± 1	95 ± 1
sB8	12:37:01.70	14:20:41.6	-55 ± 1	85 ± 1	102 ± 1
sB9	12:37:02.69	14:20:56.4	-69 ± 1	105 ± 1	125 ± 1
sB10	12:37:03.22	14:21:02.9	-81 ± 1	118 ± 1	144 ± 1
sB11	12:37:03.55	14:21:12.2	-92 ± 1	131 ± 1	160 ± 1
sB12	12:37:04.10	14:21:24.8	-103 ± 1	147 ± 1	180 ± 1
sB13	12:37:04.85	14:21:37.8	-119 ± 1	167 ± 1	205 ± 1
eM1	12:37:08.92	14:22:53.3	-211 ± 1	278 ± 1	349 ± 1

Appendix B: Best parameters Fit using Monte Carlo Markov Chain MCMC-EMCEE

Monte Carlo Markov chain MCMC-EMCEE (Foreman-Mackey et al. 2012; Hogg, Bovy, and Lang 2010) to determine the best fitting parameters for the surface brightness profile and the rotational velocity is shown in Table B.1.
MCMC-EMCEE (Foreman-Mackey et al. 2012; Hogg, Bovy, and Lang 2010) corner plots that show the orbital parameters of maximum likelihood are shown in Table B.2.

Table B.1: Markov chain Monte Carlo mcmc-emcee (Foreman-Mackey et al. 2012; Hogg, Bovy, and Lang 2010) to determine the best fitting parameters for the surface brightness profile and the rotation curve profile.

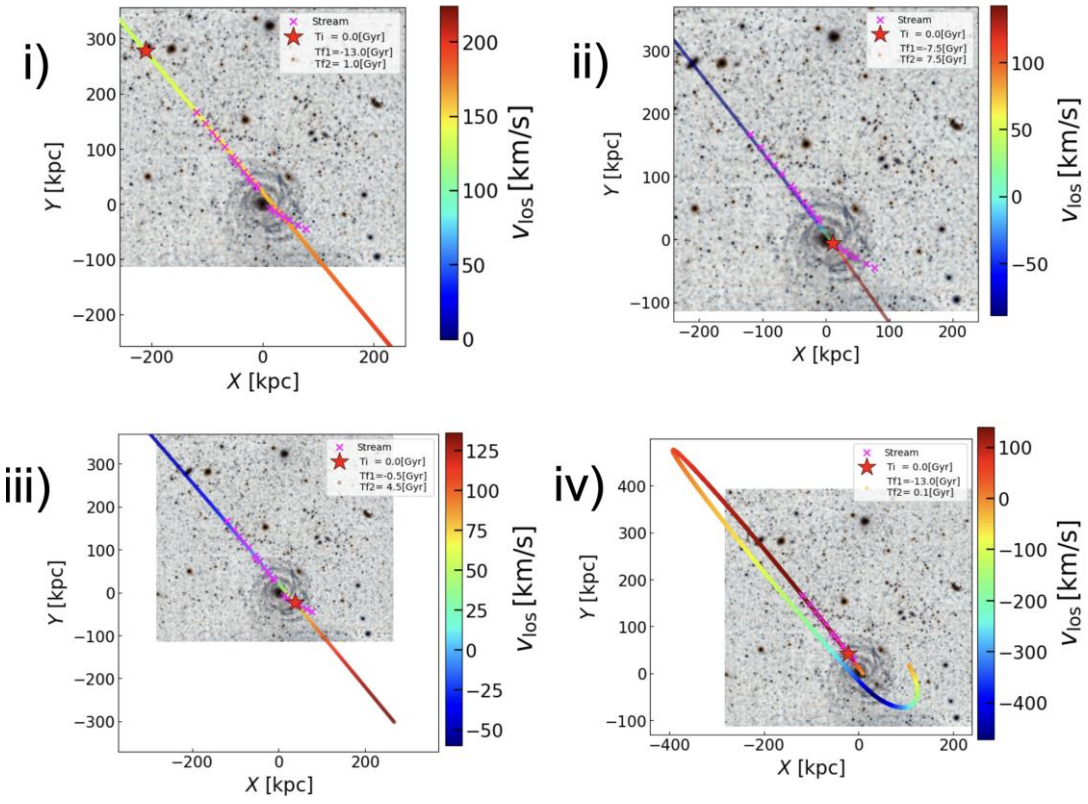
$Parameter$	$Value$
a_0	(1.00 ± 0.05) kpc
b_0	0.0 kpc
a_1	(4.6 ± 0.3) kpc
b_1	0.0 kpc
z_1	0.3 kpc
a_2	(94^{+7}_{-6}) kpc
b_2	0.0 kpc
z_2	0.3 kpc
a_3	93 kpc
b_3	0.0 kpc
z_3	0.0 kpc
L_0	$1.25^{+0.06}_{-0.06} \times 10^{10}\, L_\odot$
L_1	$2.33^{+0.07}_{-0.07} \times 10^{10}\, L_\odot$
L_2	$7.1^{+0.6}_{-0.5} \times 10^{10}\, L_\odot$
$(M/L)_{NFW}$	$3.2^{+0.5}_{-0.5}\, (M/L)_\odot$

$Parameter$	$Value$
$(M/L)_{Isothermal}$	$3.4^{+0.5}_{-0.5}\,(M/L)_{\odot}$
ρ_0	$\sim 6^{+2}_{-3} \times 10^6\, M_{\odot}\,\mathrm{pc}^{-3}$
l_s	$\sim 21^{+6}_{-3}\,\mathrm{kpc}$

Table B.2: Markov chain Monte Carlo mcmc-emcee (Foreman-Mackey et al. 2012; Hogg et al. 2010) corner plot distributions showing the maximum likelihood orbital parameters for the bound orbits found.

Scenario	z [kpc]	v_t [km/s]	PA [deg]	R_{peri} [kpc]	R_{apo} [kpc]	Ellipticity
Ia	-8	532	39	357	4775	0.47
IIa	1	472	217	28	378	0.50
IIb	-64	378	217	49	296	0.30
IIIa	-43	66	1	55	257	0.33
IVa	-138	311	0	112	246	0.08
Va	-5	590	0	13	250	0.57
Vb	-7	711	0	10	3046	0.88

Figura B.1: Unbound orbits: panel i) Scenario I-b: eM1+sB+sA, panel ii) Scenario III-b: M1B+sB+sA, and panel iii) Scenario IV-b: M1A+sA+sB. Panel iv) Scenario II-a: M1C + sB, solution contained in Scenario II-b: M1C + sB + sA, as shown in Fig. 7



Referencias bibliográficas

- Abazajian, K. N., Adelman-McCarthy, J. K., Agüeros, M. A., et al. (2009). The seventh data release of the Sloan Digital Sky Survey. The Astrophysical Journal Supplement Series, 182(2), 543–558.
- Aditya, K., Banerjee, A., Kamphuis, P., et al. (2023). H I 21cm observations and dynamical modelling of the thinnest galaxy: FGC 2366. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 526(1), 29–42.
- Antonini, F. (2013). Origin and growth of nuclear star clusters around massive black holes. The Astrophysical Journal, 763(1), 62.
- Bannikova, E. Y. (2018). The structure and stability of orbits in Hoag-like ring systems. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 476(3), 3269–3277.
- Barth, A. J. (2007). A normal stellar disk in the galaxy Malin 1. Technical Report.

- Bekki, K., Couch, W. J., & Drinkwater, M. J. (2001). Galaxy threshing and the formation of ultracompact dwarf galaxies.
- Bell, E. F., & De Jong, R. S. (2001). Stellar mass-to-light ratios and the Tully-Fisher relation.
- Berg, M., Galaz, G., Puzia, T., et al. (2024). Untangling the Nature of the Kennicutt Relation at the Low End: the Iconic Case of the Giant Low Surface Brightness Galaxy Malin 1.
- Binney, J. (2024). Disc distortion revisited. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.
- Binney, J., & Tremaine, S. (2008). Galactic Dynamics (2nd ed.). Princeton University Press.
- Blair, W. P., Long, K. S., Winkler, P. F., et al. (2019). The Fireworks Galaxy, NGC 6946: Looking at the Fading Embers.
- Blaña, M., Burkert, A., Fellhauer, M., et al. (2020). Dwarfs in the Milky Way halo outer rim: First infall or backsplash satellites? Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 497(3), 3601–3622.
- Boissier, S., Boselli, A., Ferrarese, L., et al. (2016). The properties of the Malin 1 galaxy giant disk: A panchromatic view from the NGVS and GUViCS surveys.
- Bonaca, A., Naidu, R. P., Conroy, C., et al. (2021). Orbital clustering identifies the origins of Galactic stellar streams. The Astrophysical Journal Letters, 909(2), L26.
- Bothun, G. D., Impey, C. D., Malin, D. F., & Mould, J. R. (1987). Discovery of a huge low-surface-brightness galaxy: A protodisk galaxy at low redshift?
- Bustos-Espinoza, R. O. E., Blaña, M., Galaz, G., & Gil, S. (2023). Perturbation effects and the evolution of gLSBGs: The case of Malin 1 - Past interactions with satellite galaxies. In C. Mateu (Ed.), XVII Latin American Regional IAU Meeting. Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica.
- Chilingarian, I., Lau, R. M., Herter, T. L., et al. (2015). Old supernova dust factory revealed at the Galactic center. Science, 348(6233), 413–418.

- Cook, D. O., Mazzarella, J. M., Helou, G., et al. (2023). Completeness of the NASA/IPAC Extragalactic Database (NED) Local Volume Sample. The Astrophysical Journal Supplement Series, 268(1), 14.
- Das, M. (2013). Giant Low Surface Brightness Galaxies: Evolution in Isolation. Journal of Astrophysics and Astronomy, 34, 19–34.
- De Blok, W. J. G., & Bosma, A. (2002). High-resolution rotation curves of low surface brightness galaxies. Astronomy and Astrophysics, 385(3), 816–846.
- Deason, A. J., & Belokurov, V. (2024). Galactic Archaeology with Gaia. Elsevier B.V.
- Deason, A. J., Koposov, S. E., Fattahi, A., & Grand, R. J. (2023). Unravelling the mass spectrum of destroyed dwarf galaxies with the metallicity distribution function. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 520(4), 6091–6103.
- Dey, A., Schlegel, D. J., Lang, D., et al. (2019). Overview of the DESI Legacy Imaging Surveys. The Astronomical Journal, 157(5), 168.
- Di Teodoro, E. M., Posti, L., Fall, S. M., et al. (2023). Dark matter halos and scaling relations of extremely massive spiral galaxies from extended H I rotation curves. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 518(4), 6340–6354.
- Disney, M. J. (1976). Visibility of galaxies. Nature, 263(5578), 573–575.
- Du, W., Cheng, C., Zheng, Z., & Wu, H. (2020). Stellar mass and stellar mass-to-light ratio–color relations for low surface brightness galaxies. The Astronomical Journal, 159(4), 138.
- Fall, S. M. (1983). Galaxy Formation: Some Comparison Between Theory and Observations.
- Fardal, M. A., Babul, A., Geehan, J. J., & Guhathakurta, P. (2006). Investigating the Andromeda stream - II. Orbital fits and properties of the progenitor. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 366(3), 1012–1028.
- Fellhauer, M., Evans, N. W., Belokurov, V., et al. (2006). Is Ursa Major II the Progenitor of the Orphan Stream?

- Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D., & Goodman, J. (2012). emcee: The MCMC Hammer.
- Freeman, K. C. (1970). On the disks of spiral and S0 galaxies. The Astrophysical Journal, 160, 811.
- Galaz, G., Frayer, D. T., Blaña, M., et al. (2022). The giant low surface brightness galaxy Malin 1: New constraints for its molecular gas mass from GBT/ARGUS observations. The Astrophysical Journal Letters, 940(2), L37.
- Galaz, G., González-López, J., Guzmán, V., et al. (2024). First Detection of Molecular Gas in the Giant Low Surface Brightness Galaxy Malin 1.
- Galaz, G., Milovic, C., Suc, V., et al. (2015). Deep optical images of Malin 1 reveal new features. The Astrophysical Journal, 815(2), L29.
- Gerritsen, J. P. E., & De Blok, W. J. G. (1999). Star formation and the interstellar medium in low surface brightness galaxies III. Why they are blue, thin and poor in molecular gas.
- Hoffman, Y., Silk, J., & Wyse, R. F. G. (1992). The formation of giant low surface brightness galaxies. The Astrophysical Journal, 388, 34–41.
- Hogg, D. W., Bovy, J., & Lang, D. (2010). Data analysis recipes: Fitting a model to data.
- Ibata, R., Chapman, S., Ferguson, A. M., et al. (2004). Taking measure of the Andromeda halo: A kinematic analysis of the giant stream surrounding M31.
- Impey, C., & Bothun, G. (1997). Low surface brightness galaxies. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 35, 267–307.
- Ji, X., Li, C., Yan, R., et al. (2021). SDSS-IV MaNGA: The physical origin of off-galaxy H blobs in the local Universe. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 508(3), 3943–3966.
- Johnston, E. J., Galaz, G., Blaña, M., et al. (2024). A MUSE view of the core of the giant low-surface-brightness galaxy Malin 1. Astronomy and Astrophysics, 686, A163.

- Junais, Weilbacher, P. M., Epinat, B., et al. (2024). MUSE observations of the giant low surface brightness galaxy Malin 1: Numerous HII regions, star formation rate, metallicity, and dust attenuation? Astronomy and Astrophysics, 681.
- Kalberla, P. M., & Kerp, J. (2009). The HI distribution of the Milky Way. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 47, 27–61.
- Kazantzidis, S., Prada, F., Martínez-Delgado, D., & Mahoney, T. (2003). Galaxies and Overmerging: What Does it Take to Destroy a Satellite Galaxy?
- Kim, J. H., Peirani, S., Kim, S., et al. (2014). Formation of Warped Disks by Galactic Fly-by Encounters. I. Stellar Disks.
- Kim, S., Jeong, H., Rey, S.-C., et al. (2020). Compact elliptical galaxies in different local environments: A mixture of galaxies with different origins? The Astrophysical Journal, 903(1), 65.
- Lelli, F., Fraternali, F., & Sancisi, R. (2010). Structure and dynamics of giant low surface brightness galaxies.
- Lintott, C., Schawinski, K., Bamford, S., et al. (2011). Galaxy Zoo 1: Data release of morphological classifications for nearly 900 000 galaxies. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 410(1), 166–178.
- Long, K. S., & Murali, C. (1992). Analytical Potentials for Barred Galaxies.
- Maeda, F., Egusa, F., Ohta, K., et al. (2022). CO(2–1)/CO(1–0) line ratio on a ~100 parsec scale in the nearby barred galaxy NGC 1300. The Astrophysical Journal, 926(1), 96.
- Mao, Y.-Y., Geha, M., Wechsler, R. H., et al. (2021). The SAGA Survey. II. Building a statistical sample of satellite systems around Milky Way–like galaxies. The Astrophysical Journal, 907(2), 85.
- Mapelli, M., Moore, B., Ripamonti, E., et al. (2007). Are ring galaxies the ancestors of giant low surface brightness galaxies? Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 383(3), 1223–1231.

- Martínez-Delgado, D., Cooper, A. P., Román, J., et al. (2023). Hidden depths in the local Universe: The Stellar Stream Legacy Survey. Astronomy and Astrophysics, 671.
- Martínez-Delgado, D., Román, J., Erkal, D., et al. (2021). A feather on the hat: Tracing the giant stellar stream around the Sombrero galaxy. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 506(4), 5030–5038.
- Miro-Carretero, J., Gomez-Flechoso, M. A., Martinez-Delgado, D., et al. (2024). Extragalactic Stellar Tidal Streams: Observations meet Simulation.
- Miyamoto, N., & Nagai, R. (1975). Three-dimensional models for the distribution of mass in galaxies. Publications of the Astronomical Society of Japan, 27, 533–543.
- Mo, H., van den Bosch, F. C., & White, S. (2010). Galaxy Formation and Evolution. Cambridge University Press.
- Moore, L., & Parker, Q. A. (2006). Malin 1: A deeper look. Publications of the Astronomical Society of Australia, 23(4), 165–169.
- Navarro, J. F., Frenk, C. S., & White, S. D. M. (1996). The structure of cold dark matter halos. The Astrophysical Journal, 462, 563.
- Nelson, D., Pillepich, A., Springel, V., et al. (2018). First results from the IllustrisTNG simulations: The galaxy colour bimodality. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 475(1), 624–647.
- Niederste-Ostholt, M., Belokurov, V., & Evans, N. W. (2012). A tale twice told: The luminosity profiles of the Sagittarius tails. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 422(1), 207–214.
- Noguchi, M. (2001). Formation of giant low surface brightness galaxies through disc instability. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 328(2), 353–358.
- Ogle, P. M., Lanz, L., Appleton, P. N., et al. (2019). A Catalog of the Most Optically Luminous Galaxies at z < 0.3: Super Spirals, Super Lenticulars, Super Post-

mergers, and Giant Ellipticals. The Astrophysical Journal Supplement Series, 243(1), 14.

- Ogle, P. M., Lanz, L., Nader, C., & Helou, G. (2016). Superluminous spiral galaxies. The Astrophysical Journal, 817(2), 109.
- Panithanpaisal, N., Sanderson, R. E., Wetzel, A., et al. (2021). The galaxy progenitors of stellar streams around Milky Way–mass galaxies in the FIRE cosmological simulations. The Astrophysical Journal, 920(1), 10.
- Peñarrubia, J., Mcconnachie, A., & Babul, A. (2006). On the formation of extended galactic disks by tidally disrupted dwarf galaxies.
- Pérez-Montaño, L. E., Rodriguez-Gomez, V., Cervantes Sodi, B., et al. (2022). The formation of low surface brightness galaxies in the IllustrisTNG simulation. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 514(4), 5840–5852.
- Petrosian, V. (1976). Surface brightness and evolution of galaxies.
- Pickering, T. E., Impey, C. D., Van Gorkom, J. H., & Bothun, G. D. (1997). Neutral hydrogen distributions and kinematics of giant low surface brightness disk galaxies.
- Pillepich, A., Nelson, D., Hernquist, L., et al. (2018). First results from the IllustrisTNG simulations: The stellar mass content of groups and clusters of galaxies. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 475(1), 648–675.
- Plummer, H. C. (1911). On the problem of distribution in globular star clusters. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 71, 460–470.
- Psychogyios, A., Charmandaris, V., Diaz-Santos, T., et al. (2016). Morphological classification of local luminous infrared galaxies. Astronomy and Astrophysics, 591.
- Reshetnikov, V. P., Moiseev, A. V., & Sotnikova, N. Y. (2010). Malin 1: interacting galaxy pair?

- Román, J., Rich, R. M., Ahvazi, N., et al. (2023). A giant thin stellar stream in the Coma Galaxy Cluster. Astronomy and Astrophysics, 679.
- Saburova, A., & Cherepashchuk, A. (2021). Astronomy at the epoch of multimessenger studies. VAK Proceedings.
- Saburova, A. S., Chilingarian, I. V., Kulier, A., et al. (2023). The volume density of giant low surface brightness galaxies. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters, 520(1), L85–90.
- Saha, K., Dhiwar, S., Barway, S., et al. (2021). The central region of the enigmatic Malin 1. Journal of Astrophysics and Astronomy.
- Saha, K., Tseng, Y. H., & Taam, R. E. (2010). The effect of bars and transient spirals on the vertical heating in disk galaxies. The Astrophysical Journal, 721(2), 1878–1890.
- Salinas, V. H., & Galaz, G. (2021). The effect of the angular momentum in the formation and evolution of low surface brightness galaxies. The Astrophysical Journal, 915(2), 125.
- SDSS SkyServer. (2024). SkyServer DR18.
- Smith, R., Fellhauer, M., Candlish, G. N., et al. (2013). Ursa Major II - Reproducing the observed properties through tidal disruption.
- Vera-Casanova, A., Gómez, F. A., Monachesi, A., et al. (2022). Linking the brightest stellar streams with the accretion history of Milky Way like galaxies. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 514(4), 4898–4911.
- Zaritsky, D., Crossett, J. P., Jaffé, Y. L., et al. (2023). An enigmatic 380 kpc long linear collimated galactic tail. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 524(1), 1431–1437.
- Zhu, Q., Pérez-Montaño, L. E., Rodriguez-Gomez, V., et al. (2023). Giant low surface brightness galaxies in TNG100. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 523(3), 3991–4014.

- Zhu, Q., Xu, D., Gaspari, M., et al. (2018). Formation of a Malin 1 analogue in IllustrisTNG by stimulated accretion. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters, 480(1), L18–22.

QSO SPECTRAL COMPOSITION AND MEAN SPECTRUM OF QUASARS IN SDSS

(Plenaria)

M.Sc. EVANZ LAZARO

lazaro.evanzv@gmail.com

Semblanza:

Evanz Lázaro es físico de profesión de la UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRES (UMSA) de La Paz-Bolivia. Especializado en sismología en el Instituto Geofísico Sismológico (IGSV) de la Universidad Nacional de San Juan (UNSJ)-Argentina. Cuenta con una Maestría en Astrofísica de la Universidad Internacional de Valencia (VIU). En el ámbito científico, ha desarrollado investigaciones en sismología, geofísica y Astrofísica, publicando trabajos en revistas indexadas y congresos internacionales. Asimismo, colaboró con el Observatorio San Calixto (OSC), el Instituto de Investigaciones Físicas en proyectos relacionados con sismología y geodinámica y con el equipo del Instituto de Altas Energías (IFAE) y la Universidad Politécnica de Cataluña (UPC), en el estudio de Evolución de Cuásares (en desarrollo).

Introducción

Uno de los tipos de galaxias más luminosos es el cuásar o QSO (del inglés *quasi-stellar object*) caracterizado por la presencia de agujeros negros supermasivos en su núcleo, con masas entre 10^4–10^{10} $M_\odot$ (masas solares) (Beckmann & Shrader 2012), y estos dan lugar a fenómenos de altas emisiones de energía alimentados por la gran cantidad de materia que absorben del disco de acreción que los rodea (Kormendy & Richstone 1995). Estos procesos generan líneas de emisión asociadas a diferentes rangos de ionización,

por ejemplo; en el espectro óptico se suelen caracterizar líneas de alta ionización como el [NeV]λ3426A°, [$FeVII$]λ5721A°, [FeX]λ6375A°, provenientes de fuentes ionizantes del núcleo galáctico y su interacción con el disco de acreción (Rakshit et al. 2020). El conjunto de líneas de emisión a lo largo de las longitudes de onda, componen el espectro de un QSO. El análisis del continuo de los espectros y las líneas de emisión, pueden proporcionar información sobre los núcleos de galaxias, por ejemplo, la luminosidad de la línea del [OIII]λ5007A° puede utilizarse como indicador de cuan intensa es su actividad, definiendo así una AGN (del inglés *active galactic nucleus*).

Por la expansión del universo, todos los espectros de cuásares sufren un desplazamiento de sus longitudes de onda hacia el rojo, este fenómeno es denominado corrimiento al rojo cosmológico (redshift). Galaxias anfitrionas de AGNs de alta luminosidad tienen edades estelares medias mucho más jóvenes, que galaxias anfitrionas de AGNs de baja luminosidad (Kauffmann et al. 2003).

A pesar de la diversidad de cuásares, estos muestran similitudes entre ellos; efectivamente, cuando se considera un numero grande de cuásares, resaltan propiedades espectrales comunes (Vanden Berk et al. 2001); sin embargo, también prevalecen diferencias espectrales fundamentales como la anchura a media altura FWHM; por ejemplo, la línea Hβ (Shen & Ho 2014), que se diferencia de cuásar a cuásar y que, dígase de paso, permite estimar la M_{MBH} que es una propiedad importante de los cuásares.

Los estudios de propiedades espectrales están basados en la técnica de composición espectral cuya finalidad es construir un espectro medio representativo de la muestra. Cuando la muestra es grande, los espectros compuestos logran conseguir altas relaciones señal/ruido (S/N) (Jensen et al. 2016), lo que permite identificar líneas de emisión que no se podrían identificar en espectros individuales (Harris et al. 2016).

En 1977 Jack A. Baldwin (Baldwin 1977), calcula el primer espectro compuesto con una muestra de 20 cuásares con red shift en el rango z: [1.24 – 3.53] y encuentra una relación entre dos propiedades de las líneas de emisión de un cuásar: la luminosidad y el ancho

equivalente (EW). Esta relación mostraba una anti correlación entre la luminosidad continua a 1450A° y el de las líneas de emisión del CIVλ1550A, dicha dependencia se conoce como efecto de Baldwin (BE), Jensen et al. (2016).

Posteriormente se publicaron trabajos de espectros compuestos con centenares de cuásares como el de Francis et al. (1991) de 718 muestras obtenidos del estudio Large Bright Quasar Survey, que les permitió identificar y caracterizar emisiones débiles del perfil de línea de Fe II en el ultravioleta (UV). El trabajo de Brotherton et al. (2001) que utilizo 657 espectros de cuásares con fuertes emisiones de radio e introduce la modalidad de composiciones espectrales a partir de subconjuntos de la muestra total, clasificados en cuásares radio-intensos (radio-load) y radio- silenciosos (radio-quiet), para estudiar las diferencias espectrales entre ambas poblaciones de cuásares.

Uno de los trabajos más conocidos y referente en espectros compuestos es el de Vanden Berk et al. (2001), que incluye 2200 espectros de cuásares y crea espectros compuestos en el rango de red shift $0.044 \leq z \leq 4.789$. Logra identificar 80 características sobre las líneas de emisión, a la vez observa un desplazamiento relativo de las líneas de emisión respecto de la longitud de onda nominal de laboratorio. Es importante destacar de este trabajo la fuerte correlación entre el desplazamiento de los picos máximos de las líneas anchas (permitidas y semi prohibidas) con la energía de ionización.

Trabajos posteriores como de Xu et al. (2008), Jensen et al. (2016), Harris et al. (2016), investigan sobre el parámetro principal e impulsor del BE. En la misma línea el trabajo de Bian et al. (2012) encuentra que para altos red shift existe una fuerte correlación entre el EW del CIV y la M_{BH} medido a partir del CIV.

Trabajos actuales como el de Jensen et al. (2016), consideran una gran cantidad de cuásares (175294) que, subdivididos en grupos menores en promedio de 58656 cuásares, crean espectros compuestos de alta relación S/N para rangos de red shift entre $2.1 \leq z \leq 3.5$. Una extensión de este trabajo es el de Harris et al. (2016), con 102150 espectros del estudio BOSS, donde crean espectros compuestos con muy alta relación S/N de 1000 por

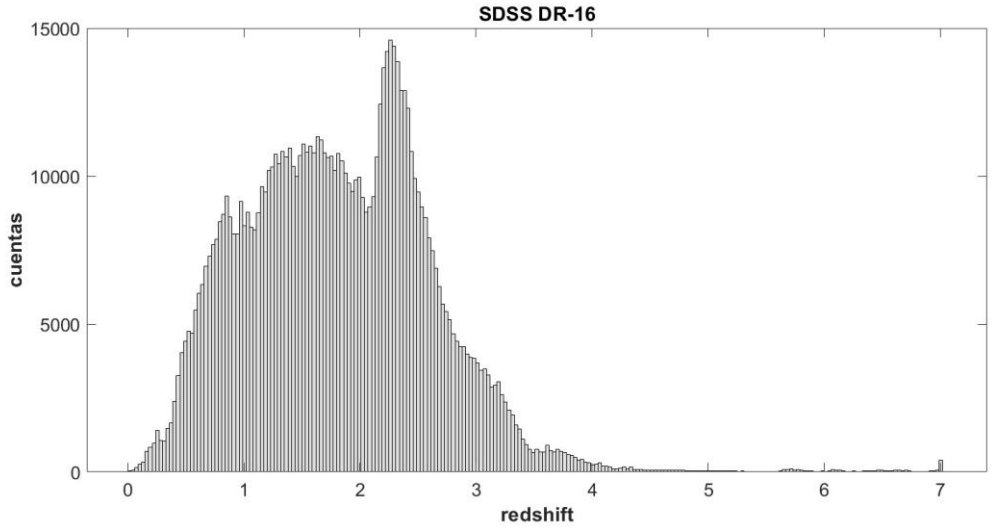
pixel, en el rango de [800–3300]A°. logrando identificar nueve líneas débiles que no se identificaron en trabajos previos.

En este trabajo se ha calculado el espectro medio con los causares del catálogo DR16Q, constituyéndose a la fecha, como uno de los espectros medios compuestos con la mayor cantidad de cuásares, alcanzan- do una máxima relación S/N de 1418 por píxel y una media S/N de 701 por píxel.

2. DATOS Y FLUJO DE TRABAJO

El cálculo de espectros medios requiere de una gran cantidad de espectros de cuásares y más a un de la disponibilidad de los mismos. Sloan Digital Sky Survey (SDSS) es un proyecto de investigación que compila la mayor colección de cuásares, publicados periódicamente como "data release" de libre accesibilidad en la red (Lyke et al. 2020). El formato de archivos (.fit) es el estándar para datos espectrales, existen librerías completas y códigos en diferentes plataformas para el tratamiento de estos datos, en este trabajo se utilizó MatLab R2022a.

Figura. 1: Histograma de cuásares por redshift para el catálogo DR16Q. La cobertura en redshift alcanza desde 0.04 hasta 7, siendo el rango de redshift entre 0.5 y 3.5 con la mayor concentración de cuásares. Los picos o sesgos que se observan en el histograma se deben a conjunciones posteriores de diferentes campañas de observación SDSS.



Partimos de los datos del catálogo DR16Q que contiene un total de 1440615 observaciones de los cuales 750414 son cuásares confirmados espectroscópicamente (Lyke et al. 2020). Cabe hacer notar que algunos de los cuásares tienen múltiples observaciones (espectros) debido a que el catálogo DR16Q contempla observaciones del proyecto BOSS (Baryon Oscillation Spectroscopic Survey). La muestra final que tomamos en este trabajo es de 830740 espectros para 750414 cuásares.

En la figura 1 podemos observar, la distribución de cuásares en función de redshift. Los sesgos que se observan en el histograma, se deben a que el número de cuásares aumento significativamente en las últimas décadas además de la conjunción de las diferentes campanas de SDSS.

Para mantener cierto control de nuestro procedimiento, tomaremos la clasificación inicial del trabajo de Jensen et al. (2016), que hace una selección completa de cuásares en los intervalos 2 .10 ≤ z < 2.35; 2.35 ≤ z < 2.60 y 2.60 ≤ z < 3.50. Aquí extendemos esta clasificación a ocho intervalos de redshift mostrados en el cuadro 1, donde además se muestra el número de observaciones por intervalo de redshift.

Figura.2: Representación gráfica de la clasificación de cuásares por intervalos de redshift de la tabla 1 y distinguido por colores. Cada intervalo de redshift cubre un rango de longitud de onda diferente la cual disminuye a medida que crece el redshift. Esta gráfica muestra, además, que para intervalos de redshift contiguos existen rangos de longitud de onda comunes, sin embargo; no existe un solo rango de longitudes de onda que cubra todos los intervalos de redshift.

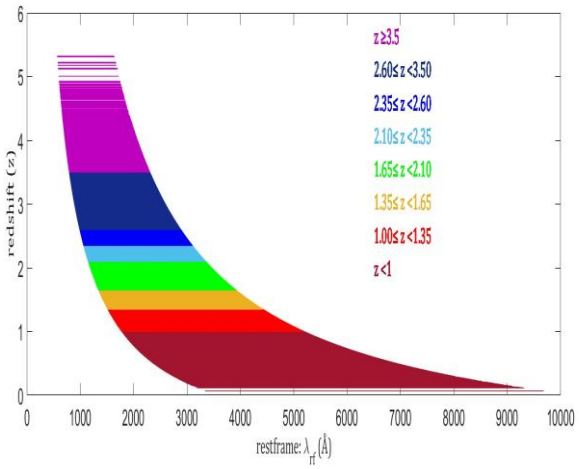


TABLA 1: En la tabla se muestra un resumen de la distribución del número de espectros por intervalos de redshift, correspondiente a cada catalogo DR16Q. En la última columna se muestra el número de espectros. El intervalo para redshift altos $z \geq 3.50$ contiene el menor número de cuásares.

Clasificacion Espectros DR16Q

No.Interv	Intervalo z	Observaciones
1	$z <$ 1.00	144501
2	1.00 ≤ $z <$ 1.35	110930
3	1.35 ≤ $z <$ 1.65	107678
4	1.65 ≤ $z <$ 2.10	151028
5	2.10 ≤ $z <$ 2.35	107429
6	2.35 ≤ $z <$ 2.60	87066
7	2.60 ≤ $z <$ 3.50	106464
8	$z \geq$ 3.50	15644

La figura 2 muestra la misma clasificación por intervalos de redshift de la tabla 1, pero ahora mostrando el rango de longitudes de onda cubierto por cada intervalo de redshift y distinguido por colores. En general la muestra completa tiene una cobertura entre 516A° y 9681 A°.

En la misma figura, la forma que representa el redshift con la longitud de onda es el comportamiento de una función tipo inversa consecuencia de un proceso denominado *corrección por redshift* aplicado a los cuásares.

3. CALCULO DEL ESPECTRO MEDIO

Para la estimación del espectro medio se sigue la metodología empleada en Pérez-Rafols et al. (2015), compilada en dos partes en este trabajo.

3.1. *Procesamiento de Datos*

El primer paso, conocido como corrección por redshift, consiste en llevar todos los espectros de cuásares a un mismo sistema de referencia de longitudes de onda denominado *sistema en reposo* (rest frame), en este sistema las longitudes de onda λ_{rf} se relacionan con las observadas λ_{obs} por:

$$\lambda_{rf} = \frac{\lambda_{obs}}{1+z}, \qquad (1)$$

Posteriormente, en el sistema en reposo se selecciona una nueva escala de longitudes de onda común donde todos los espectros son remuestreados. Esta nueva escala puede entenderse como un arreglo lineal de celdas (bin) de 1A° de ancho, preservando el mismo ancho de bin de los espectros originales. Cada bin en la nueva escala será llenada con valores de la densidad de flujo de los espectros que contribuyan a cada bin.

El segundo paso consiste en normalizar cada espectro j mediante el coeficiente de normalización n_j. El objetivo de normalizar espectros es el de homogeneizar la intensidad media de los distintos cuásares, que varía en función de su brillo aparente.

Matemáticamente, el coeficiente de normalización está definido como el valor medio del flujo del espectro j en un intervalo de longitud de onda (intervalo de normalización).

$$n_j = \frac{\sum_j f_{ij}}{N_j}, \qquad (2)$$

donde f_{ij} es el valor del flujo en el $i - esimo$ píxel del espectro j con longitudes de onda λ_{ij} en el intervalo considerado y N_j es el número de pixeles en el mismo intervalo.

Si dividimos un espectro por su coeficiente de normalización obtendremos el continuo del espectro normalizado a la unidad en el intervalo definido.

Sobre el mismo intervalo de normalización, para cada espectro j, se calcula el parámetro s_j que es el valor medio de la relación señal/ruido, esto es:

$$s_j = \frac{\sum_i f_{ij}/N_j}{\left[\sum_i (e_{ij})^2/N_j\right]^{1/2}}, \qquad (3)$$

donde e_{ij} es el error asociado al flujo f_{ij} del espectro j. El parámetro s_j está vinculado al factor de ponderación para el cálculo del espectro medio.

El tercer paso consiste en calcular el espectro medio como un promedio ponderado de todos los espectros j y con coeficiente de normalización n_j cuyas muestras contribuyan a un mismo bin de la escala del sistema en reposo, esto es:

$$\bar{f}_i = \frac{\sum_j \omega_j \left(\frac{f_{ij}}{n_j}\right)}{\sum_j \omega_j}, \qquad (4)$$

donde ω_j es un peso de ponderación y está dado por:

$$\omega_j = \frac{1}{s_j^{-2} + \sigma^2}. \qquad (5)$$

En la expresión anterior la constante σ = 0.05 juega el rol de ecualizador entre espectros que tienen alta relación S/N y espectros ruidosos, evitando la contribución excesiva de uno de estos espectros al promedio final del espectro medio.

3.2. *Intervalos de Normalización*

El criterio empleado para la selección de intervalos de normalización se basa en tomar tramos de longitudes de onda en los que los espectros no presenten fuertes líneas de emisión y que al mismo tiempo cubran el mayor rango posible de longitudes de onda. Es usual tomar intervalos entre las líneas de emisión Ly α, CIV, CIII], MgII que por lo general son líneas predominantes, contrastan del resto del espectro y no muestran en sus formas de perfil de línea mayor variabilidad de cuásar a cuásar ante cambios del redshift (Paris et al. 2017).

No existe un único intervalo de longitudes de onda que sea común para todos los espectros (ver figura 2), por lo que se decidió tomar tres intervalos de normalización: uno principal y dos secundarios. El intervalo principal definido entre las líneas de emisión del CIII] y MgII, ocupa el rango [2000 – 2600]A° y los intervalos secundarios [1300 – 1500]A° entre Ly α y CIV, y [4400 – 4800]A° entre Hγ y Hβ.

Dependiendo del valor del redshift algunos espectros pueden cubrir dos intervalos de normalización lo que implica, dos coeficientes de normalización uno

Figura 3: — En el panel izquierdo, el número de espectros de cuásar que contribuyen a cada bin de 1A° del espectro medio. El pico máximo corresponde a 2342A° (738019 espectros). En el panel derecho, la relación S/N en función de la longitud de onda, la máxima relación S/N es 1418 por píxel corresponde a la longitud de onda 2367A°.

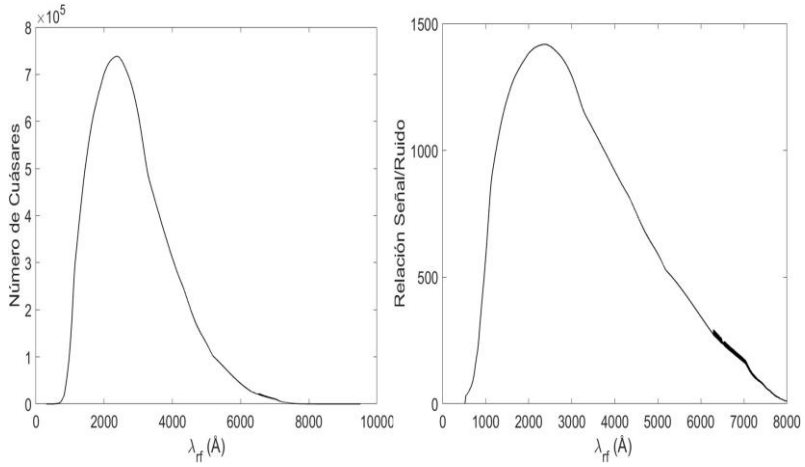


Figura. 4. En negro el espectro medio de referencia Vanden Berk et al. (2001). En azul el espectro medio generado en este trabajo. El espectro medio calculado se extiende en longitud de onda de [516 – 8000]A˚, se observa una buena correspondencia entre las líneas de emisión de ambos espectros medios. Aunque Vanden Berk et al. (2001) se extiende más allá de 8000A˚, en este trabajo hemos ganado extensión hacia las bajas longitudes de onda 516A˚.

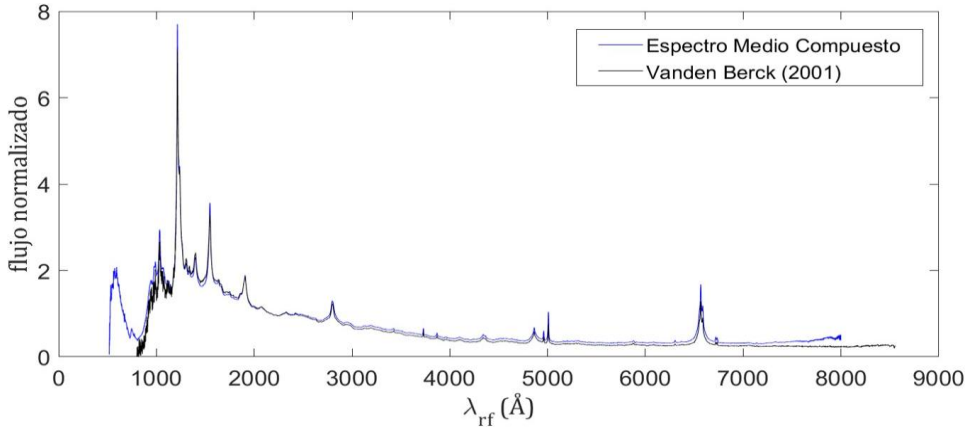


TABLA 2:

En la tabla se muestran los intervalos de normalización principal y secundario para cada intervalo de redshift.

Intervalos de normalization			
No.Interv	Intervalo z	principal (A°)	secundario (A°)
1	$z <$ 1.00	[2000 – 2600]	[4400 – 4800]
2	1.00 ≤ $z <$ 1.35	[2000 – 2600]	[4400 – 4800]
3	1.35 ≤ $z <$ 1.65	[2000 – 2600]	
4	1.65 ≤ $z <$ 2.10	[2000 – 2600]	[1300 – 1500]
5	2.10 ≤ $z <$ 2.35	[2000 – 2600]	[1300 – 1500]
6	2.35 ≤ $z <$ 2.60	[2000 – 2600]	[1300 – 1500]
7	2.60 ≤ $z <$ 3.50	[2000 – 2600]	[1300 – 1500]
8	$z \geq$ 3.50		[1300 – 1500]

en el intervalo principal y otro en alguno de los intervalos secundarios.

Sea $n_{p,j}$ el coeficiente de normalización en el intervalo principal y $n_{s,j}$ el coeficiente de normalización en un intervalo secundario para un mismo espectro j. Para llevar la normalización del intervalo secundario al principal, el coeficiente de normalización $n_{s,j}$ debe ser corregido por el factor c, mediante la operación $n_{s,j} \times c$. En la tabla 2 se ha resumido los intervalos de normalización para cada uno de los ocho intervalos de redshift. Finalmente, para el intervalo de redshift $z \geq 3.50$ que presenta solo un intervalo secundario, es posible aplicarle el factor de corrección calculado en los anteriores intervalos de redshift donde esté presente el mismo intervalo secundario.

4. RESULTADOS

En esta sección presentamos el resultado del espectro medio considerando el total de cuásares del catálogo DR16Q, es decir, 750414 cuásares.

El flujo de trabajo que se siguió es el descrito en la sección 3, además de considerar la clasificación de redshift de la tabla 1. Este proceso es una secuencia recursiva por intervalos de redshift hasta lograr remuestrar todos los espectros en el sistema en reposo y finalmente calcular el espectro medio según la ecuación 4.

El espectro medio compuesto fue normalizado en el intervalo principal [2000–2600]A° , sin embargo; también se han utilizado los intervalos de normalización secundarios de acuerdo a la tabla 2 de la sección 3.2. En el panel izquierdo de la figura 3, se muestra el número de espectros de cuásar que contribuyen a cada bin de 1A del espectro medio en el sistema en reposo, alcanzando un máximo de 738019 cuásares en 2342A°. Esta cantidad de espectros, genera una máxima relación S/N de 1418 por píxel (ver panel derecho de la figura 3). En el mismo panel, para longitudes de onda mayores a 6000A° se observan saltos y discontinuidad esto se debe a que algunos bines del sistema en reposo (remuestreo) quedan vacíos o muy saturados por la baja cantidad de espectros y cuásares que contribuyen a estos bines.

Para evaluar cualitativamente el espectro compuesto obtenido en este trabajo, en la figura 4 en azul, se sobrepone al espectro medio obtenido por Vanden Berk et al. (2001) en negro, se observa buena

Figura 5: Panel superior: [500 – 3000] A°, esta región es abundante en líneas anchas de emisión dominado principalmente por Ly α, CIII], CIV y MgII, se logra observar elementos ionizados de transiciones semi prohibidas como NIII], OIII], CIII], CII] y transiciones prohibidas como [NeIV] y [OII]. Panel intermedio: [3000 – 5500]A°, esta región está dominada por H β y [OIII] en menor intensidad se observa Hγ, [OII] y [NeIII] débilmente [NeV], HeII, NIII, [FeVII] y [CaV]. Panel inferior: [5500 – 8000]A°, región dominada por Hα, se observa también [SII], [OI], HeI, muy levemente se distinguen [ArIII] y [OII] y líneas de alta ionización como el [FeVII] y [FeX].

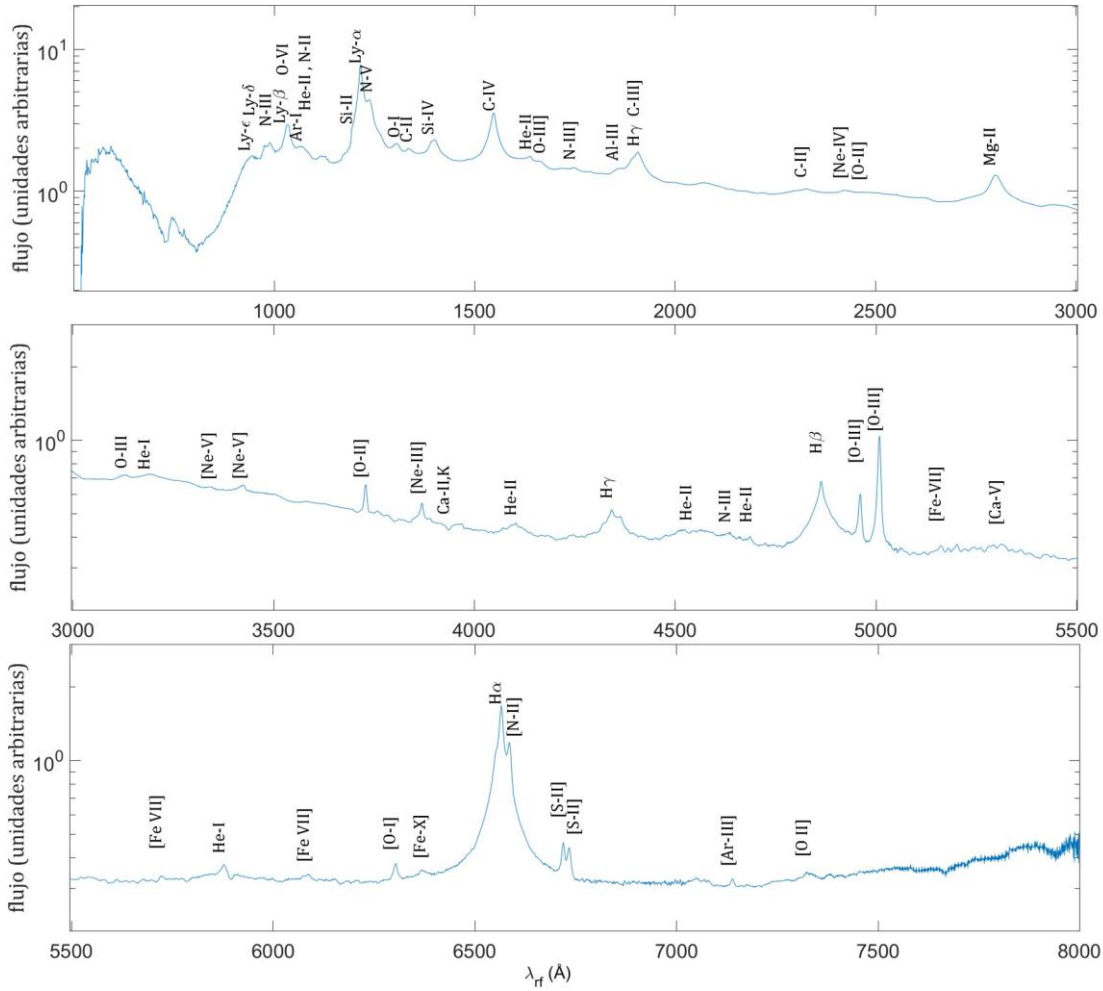
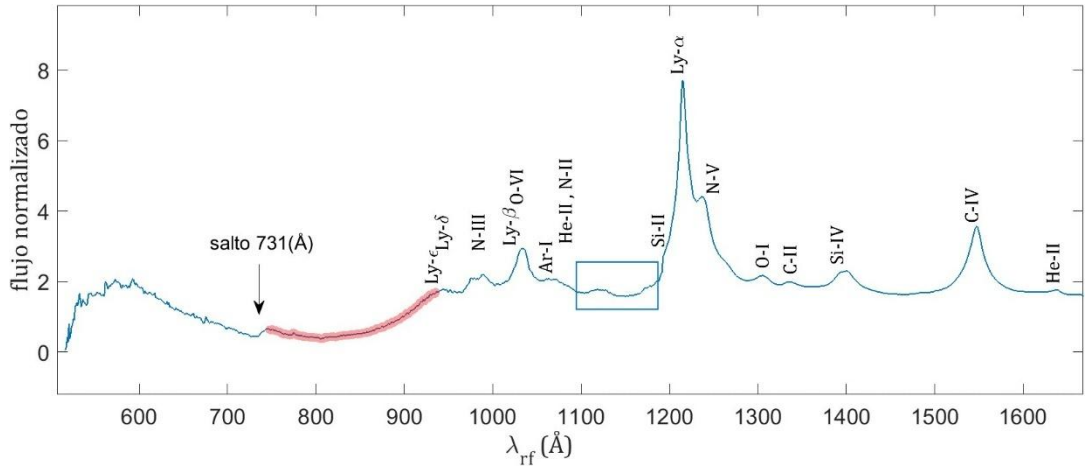


Figura 6: En recuadro azul se observa parte del continúo debilitado por el efecto Gunn-Peterson este efecto es una característica de los espectros de cuásares debido a la presencia del hidrogeno neutro en el medio intergaláctico (Becker et al. 2001). En rojo se resalta en forma de curva suave la caída del espectro hasta llegar a (731°) a partir de la cual se observa otra secuencia creciente del espectro hacia longitudes de ondas menores.

correspondencia entre ambos espectros medios especialmente en el intervalo de normalización principal [2000 – 2600]A°, ya que es el mismo en ambos trabajos. Pero también se observa una diferencia vertical en longitudes de onda fuera del intervalo principal, especialmente a mayores longitudes de onda [5000–8000]A° que se atribuye a los diferentes intervalos de normalización secundarios que se utilizó en Vanden Berk et al. (2001).



Otra medida de control del espectro medio calculado en este trabajo, fue identificar las principales líneas de emisión y verificar que sus posiciones correspondan a longitudes de onda conocidas. Para facilitar la visualización de las líneas de emisión seccionamos el espectro medio en tres regiones de longitudes de onda y adicionalmente; ponemos el eje de las ordenadas en escala logarítmica (figura 5) de esa manera se logra distinguir líneas de emisiones débiles.

5. CONCLUSIONES Y DISCUSION

A longitudes de onda por debajo de Lyα, la emisión de la mayoría de cuásares, es absorbida por presencia de hidrogeno neutro en el medio intergaláctico (IGM), lo que hace que el espectro continuo sea mucho más débil. Este hecho es conocido como el Efecto Gunn-Peterson (Becker et al. 2001) y se lo reconoce por la forma de canal que toma el espectro, ver figura 6 en recuadro azul.

Otro logro importante del espectro medio calculado, es que se ha conseguido una imagen espectral más allá, a menores longitudes de onda, del límite de Lyman (912A°).

La región entre 300 a 900A° es conocida como ultravioleta extremo (EUV). A esta región con- tribuyen cuásares con los redshift más altos. En esta región destacan líneas como HeIIλ304A° y HeIλ584A°, así como las líneas de alta ionización NeVIII+OIVλ772A° y OIII λ831A°, Kollatschny & Ting-Gui (2006). El continuo en esta región, esta caracterizada por el big blue bump, que es una discontinuidad en el UV-Óptico atribuido a la emisión térmica del disco de acreción. Se cree que el continuo EUV está relacionado con los rayos-X blandos (suaves) y que la emisión EUV es la fuente dominante de ionización para el IGM, (Telfer et al. 2002).

En este trabajo, para longitudes de onda más bajas al límite de Lyman, se observa una caída del espectro en forma de curva suave, en rojo en la figura 6, hasta encontrarse con un salto cerca a (731A°) a partir del cual el continuo empieza nuevamente a crecer.

La primera parte de la caída del espectro (en rojo) se debe a la absorción de Ly α y para compensar esta caída debe realizarse la corrección por profundidad óptica a cada espectro, sin embargo; en la segunda parte no se esperaría el crecimiento del espectro. Para explicar este hecho, hemos verificado que existen fuentes de contaminación en el conjunto de espectros utilizados para calcular el espectro medio (DR16Q), la primera fuente es que existen espectros de absorción correspondientes a estrellas, posiblemente, tipo A y la segunda es que existen malas asignaciones de redshift, se han confundido perfiles de línea entre CIV y Lyα, adicionalmente el número de cuásares que contribuyen a esta región decae de hasta el orden de centenares provocando el quiebre

en (731A°), todos estos factores hacen que el espectro medio este dominado por estas fuentes contaminantes lo que tiende a levantar el espectro medio.

Se plantea realizar nuevos espectros compuestos enfocados en la región ultravioleta extrema. Es necesario realizar las correcciones por profundidad óptica (absorción de Ly α) de todos los espectros que contribuyen a esta región (alto redshift).

Se ha revisado bibliografía de trabajos enfocados en la región de longitudes de onda menores al límite de Lγ y en general existe muy poca información; por lo que podemos considerar que esta región constituye nuevas oportunidades de investigación.

Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses respecto a la publicación de este documento

Referencias bibliográficas

- Bachev, R., Marziani, P., Sulentic, J. W., Zamanov, R., Calvani, M., & Dultzin-Hacyan, D. 2004, ApJ, 617, 171
- Baldwin, J. A. 1977, ApJ, 214, 679
- Becker, R. H., Fan, X., White, R. L., Strauss, M. A., Narayanan, V. K., Lupton, R. H., Gunn, J. E., Annis, J., Bahcall, N. A., Brinkmann, J., Connolly, A. J., Csabai, I., Czarapata, P. C., Doi, M.,
- Heckman, T. M., Hennessy, G. S., Ivezic, Z., Knapp, G. R., Lamb,˘ D. Q., McKay, T. A., Munn, J. A., Nash, T., Nichol, R., Pier, J. R., Richards, G. T., Schneider, D. P., Stoughton, C., Szalay, A. S.,
- Thakar, A. R., & York, D. G. 2001, AJ, 122, 2850
- Beckmann, V. & Shrader, C. R. 2012, Active Galactic Nuclei
- Bian, W.-H., Fang, L.-L., Huang, K.-L., & Wang, J.-M. 2012, MNRAS, 427, 2881
- Brotherton, M. S., Tran, H. D., Becker, R. H., Gregg, M. D.,

- Laurent-Muehleisen, S. A., & White, R. L. 2001, ApJ, 546, 775 du Mas des Bourboux, H. 2021, redvsblue: Quasar and emission line redshift fitting
- Francis, P. J., Hewett, P. C., Foltz, C. B., Chaffee, F. H., Weymann, R. J., & Morris, S. L. 1991, ApJ, 373, 465
- Harris, D. W., Jensen, T. W., Suzuki, N., Bautista, J. E., Dawson, K. S., Vivek, M., Brownstein, J. R., Ge, J., Hamann, F., Herbst,
- H., Jiang, L., Moran, S. E., Myers, A. D., Olmstead, M. D., & Schneider, D. P. 2016, AJ, 151, 155
- Jensen, T., Bautista, J., Dawson, K., Harris, D., Kamble, V., Mariappan, V., & Suzuki, N. 2016, in American Astronomical Society Meeting Abstracts, Vol. 227, American Astronomical Society Meeting Abstracts #227, 243.28
- Kauffmann, G., Heckman, T. M., Tremonti, C., Brinchmann, J., Charlot, S., White, S. D. M., Ridgway, S. E., Brinkmann, J., Fukugita, M., Hall, P. B., Ivezic, Z., Richards, G. T., & Schneider,˘
- D. P. 2003, MNRAS, 346, 1055
- Kollatschny, W. & Ting-Gui, W. 2006, Ap&SS, 303, 123
- Kormendy, J. & Richstone, D. 1995, ARA&A, 33, 581
- Lyke, B. W., Higley, A. N., McLane, J. N., Schurhammer, D. P.,
- Myers, A. D., Ross, A. J., Dawson, K., Chabanier, S., Martini, P., Busca, N. G., Mas des Bourboux, H. d., Salvato, M., Streblyanska, A., Zarrouk, P., Burtin, E., Anderson, S. F., Bautista, J., Bizyaev, D., Brandt, W. N., Brinkmann, J., Brownstein, J. R., Comparat, J., Green, P., de la Macorra, A., Munoz Guti˜ errez, A., Hou, J., Newman, J. A., Palanque-Delabrouille, N., Paris, I., Percival,ˆ W. J., Petitjean, P., Rich, J., Rossi, G., Schneider, D. P., Smith, A., Vivek, M., & Weaver, B. A. 2020, ApJS, 250, 8 Marziani, P., Sulentic, J. W., Plauchu-Frayn, I., & del Olmo, A. 2013, A&A, 555, A89
- Paris, I., Petitjean, P., Aubourg,ˆ E., Ross, N. P., Myers, A. D., Streblyanska, A., Bailey, S., Hall, P. B., Strauss, M. A., Anderson, S. F., Bizyaev, D., Borde, A.,

Brinkmann, J., Bovy, J., Brandt, W. N., Brewington, H., Brownstein, J. R., Cook, B. A., Ebelke, G., Fan, X., Filiz Ak, N., Finley, H., Font-Ribera, A., Ge, J., Hamann, F., Ho, S., Jiang, L., Kinemuchi, K., Malanushenko, E., Malanushenko, V., Marchante, M., McGreer, I. D., McMahon, R. G., Miralda-Escude, J., Muna, D., Noterdaeme, P., Oravetz, D., Palanque-Delabrouille, N., Pan, K., Perez-Fournon, I., Pieri, M., Riffel, R., Schlegel, D. J., Schneider, D. P., Simmons, A., Viel, M., Weaver, B. A., Wood-Vasey, W. M., Yeche, C., & York, D. G.` 2014, A&A, 563, A54

- Paris, I., Petitjean, P., Ross, N. P., Myers, A. D., Aubourg,ˆ
- E., Streblyanska, A., Bailey, S., Armengaud, E., Palanque- Delabrouille, N., Yeche, C., Hamann, F., Strauss, M. A., Albare-` ti, F. D., Bovy, J., Bizyaev, D., Niel Brandt, W., Brusa, M., Buchner, J., Comparat, J., Croft, R. A. C., Dwelly, T., Fan, X., FontRibera, A., Ge, J., Georgakakis, A., Hall, P. B., Jiang, L., Kinemuchi, K., Malanushenko, E., Malanushenko, V., McMahon, R. G., Menzel, M.-L., Merloni, A., Nandra, K., Noterdaeme, P., Oravetz, D., Pan, K., Pieri, M. M., Prada, F., Salvato, M., Schlegel, D. J., Schneider, D. P., Simmons, A., Viel, M., Weinberg, D. H., & Zhu, L. 2017, A&A, 597, A79
- Patino˜ Alvarez, V., Torrealba, J., Chavushyan, V., Cruz Gonz alez, I., Arshakian, T., Leon Tavares, J., & Popovic, L. 2016, Frontiers in Astronomy and Space Sciences, 3, 19
- Perez-R afols, I., Miralda-Escud` e, J., Lundgren, B., Ge, J., Petit- jean, P., Schneider, D. P., York, D. G., & Weaver, B. A. 2015,
- MNRAS, 447, 2784
- Rakshit, S., Stalin, C. S., & Kotilainen, J. 2020, ApJS, 249, 17
- Schmidt, M. & Green, R. F. 1983, ApJ, 269, 352
- Shen, Y. & Ho, L. C. 2014, Nature, 513, 210
- Telfer, R. C., Zheng, W., Kriss, G. A., & Davidsen, A. F. 2002, ApJ, 565, 773
- Vanden Berk, D. E., Richards, G. T., Bauer, A., Strauss, M. A., Schneider, D. P., Heckman, T. M., York, D. G., Hall, P. B., Fan, X., Knapp, G. R., Anderson, S. F., Annis,

J., Bahcall, N. A., Bernardi, M., Briggs, J. W., Brinkmann, J., Brunner, R., Burles, S., Carey, L., Castander, F. J., Connolly, A. J., Crocker, J. H., Csabai, I., Doi, M., Finkbeiner, D., Friedman, S., Frieman, J. A., Fukugita, M., Gunn, J. E., Hennessy, G. S., Ivezic, Z., Kent, S., Kunszt,˘ P. Z., Lamb, D. Q., Leger, R. F., Long, D. C., Loveday, J., Lupton, R. H., Meiksin, A., Merelli, A., Munn, J. A., Newberg, H. J., Newcomb, M., Nichol, R. C., Owen, R., Pier, J. R., Pope, A., Rockosi, C. M., Schlegel, D. J., Siegmund, W. A., Smee, S., Snir, Y., Stoughton, C., Stubbs, C., SubbaRao, M., Szalay, A. S., Szokoly, G. P., Tremonti, C., Uomoto, A., Waddell, P., Yanny, B., & Zheng, W. 2001, AJ, 122, 549

- Veron-Cetty, M. P., V eron, P., & Gonc¸alves, A. C. 2001, A&A, 372, 730
- Xu, Y., Bian, W.-H., Yuan, Q.-R., & Huang, K.-L. 2008, MNRAS, 389, 1703
- Zhang, K., Dong, X.-B., Wang, T.-G., & Gaskell, C. M. 2011, ApJ, 737, 71

APROVECHAMIENTO ENERGÉTICO CON MICRO HIDROENERGÍA EN RÍO YATA: UNA ALTERNATIVA PARA EL DESARROLLO SOSTENIBLE DE COMUNIDADES RURALES AISLADAS

(Plenaria)

PASCUAL MALDONADO LOPEZ

pascualmaldonado.l@fcyt.umss.edu.bo

Semblanza:

Pascual Maldonado López es ingeniero mecánico, investigador y docente de la Universidad Mayor de San Simón (UMSS) de Cochabamba, Bolivia. Doctor en Energía y Desarrollo, Máster en Ingeniería Integrada por Computador y especialista en CAD/CAM, desarrolla su labor en la Facultad de Ciencias y Tecnología. Sus áreas de docencia e investigación abarcan diseño mecánico, tecnología de fabricación y energías sostenibles. Entre sus contribuciones destacan estudios sobre electromovilidad en Bolivia, sistemas de almacenamiento para vehículos eléctricos y automatización del diseño de engranajes mediante programación en AutoCAD, consolidándose como referente de la ingeniería mecánica y la sostenibilidad energética en la región.

Introducción

1.1 Contexto Social y Energético de las Comunidades Rurales Aisladas

El acceso a la energía eléctrica constituye un derecho fundamental y un factor determinante para el desarrollo humano sostenible. Sin embargo, en América Latina y el

Caribe, aproximadamente 19 millones de personas aún no tienen acceso a este servicio básico [4]. En Bolivia, la situación es particularmente crítica en las zonas rurales, donde existe una marcada brecha entre áreas urbanas y rurales [5]. Según datos del Banco Interamericano de Desarrollo, alrededor de 2 millones de personas en Bolivia carecen de acceso a energía eléctrica, concentrándose principalmente en áreas rurales dispersas [6].

La región amazónica boliviana, que comprende los departamentos de Beni y Pando, presenta condiciones particularmente desafiantes para la electrificación convencional. En Bolivia coexisten dos realidades: una realidad urbana energéticamente satisfecha con combustibles modernos y una realidad rural aislada, inconexa y marginada del mercado energético nacional, donde habita casi la mitad de la población del país [7]. La alta dispersión poblacional, las dificultades de acceso y comunicación, la diversidad de ecosistemas y la escasa integración rural a los centros de suministro de energía comercial hacen imposible la cobertura de las demandas energéticas rurales con soluciones convencionales [8].

La Organización Latinoamericana de Energía (OLADE) ha desarrollado proyectos energéticos para el fomento de iniciativas productivas en comunidades en zonas aisladas de Bolivia, Guatemala y Guyana, reconociendo la necesidad de implementar sistemas de energía rural descentralizados [9]. Sin embargo, la magnitud del desafío requiere soluciones innovadoras y tecnológicamente apropiadas que puedan ser replicadas a gran escala.

1.2 Pobreza Energética y Desarrollo Social

La falta de acceso a la energía limita también el acceso a otros servicios o electrodomésticos básicos como refrigerador para guardar los alimentos o bombillas para iluminar las viviendas por las noches [10]. En comunidades como las del río Yata, esta situación se traduce en limitaciones educativas, restricciones económicas, impacto en salud, costos económicos elevados e impacto ambiental [11].

En el caso de Bolivia, la tecnología solar está apoyando el cierre de la brecha de cobertura eléctrica, especialmente en las áreas rurales donde, hasta el año 2017, cerca de un 25% de su población no contaba con el servicio de electricidad [12]. Sin embargo, en regiones con alto potencial hidroeléctrico como la cuenca del río Yata, las soluciones basadas en micro hidroenergía ofrecen ventajas significativas sobre otras alternativas renovables.

1.3 El Potencial Hidroeléctrico como Solución Apropiada

Bolivia cuenta con un potencial hidroeléctrico de 39,900 MW de potencia, que alcanzaría una producción de 177,669 GWh, del cual se estaría utilizando solo el 1% [13]. Este enorme potencial sin explotar representa una oportunidad única para el desarrollo de soluciones energéticas sostenibles en comunidades rurales.

Las turbinas hidrocinéticas permiten generar electricidad aprovechando directamente la energía cinética del agua en movimiento, sin necesidad de embalses ni caídas de agua [14]. A diferencia de las hidroeléctricas tradicionales que requieren grandes obras de infraestructura, estas turbinas se sumergen directamente en el cauce del río y operan con el flujo natural [15]. Las turbinas hidrocinéticas se instalan en el lecho de ríos y giran con la corriente de agua, produciendo electricidad de manera continua sin interrumpir el flujo de los cuerpos de agua, reduciendo el impacto ambiental en comparación con las represas y sin requerir grandes obras de ingeniería ni desplazamiento de comunidades [16].

1.4 Descripción del Área de Estudio

El área de estudio se ubica en el departamento del Beni, Bolivia, en la cuenca baja del río Yata, afluente del río Mamoré. Las comunidades de San Francisco de Yata (margen sur) y Santa Teresa de Yata (margen norte) son los dos asentamientos humanos principales del área, con aproximadamente 50 familias cada uno. Junto a estas comunidades,

durante los recorridos de campo se identificaron dos instalaciones industriales de envergadura —un aserradero y una planta chancadora de áridos— emplazadas en la ribera del río, conformando en total cuatro puntos de interés energético [17].

La economía local se sustenta principalmente en la cosecha de castañas y en el servicio de transporte entre Guayaramerín y Cachuela Esperanza. El acceso terrestre es limitado: requiere un trayecto de 31 km por camino en condiciones irregulares desde la ciudad de Guayaramerín, y el cruce del río se realiza mediante pontones artesanales. A pesar de las difíciles condiciones de acceso, en la ribera del río existe una represa abandonada cuya infraestructura de hormigón armado podría rehabilitarse para la generación hidroeléctrica [18].

1.5 Identificación de Potencialidades del Lugar

Al recorrer el río mediante embarcación, se puede evidenciar la presencia de una represa abandonada cuya estructura de hormigón armado incluye compuertas que presentan un deterioro considerable debido al tiempo y la erosión del agua. Más del 50% de las compuertas han desaparecido, permitiendo que el agua fluya libremente [19]. En la represa abandonada, en el margen derecho del río, se pueden observar los restos de una turbina tipo Kaplan que nunca fue instalada. Esta circunstancia motiva la propuesta de turbinas tipo bulbo como alternativa técnicamente equivalente y de más fácil instalación en las condiciones actuales de la represa (véase Sección 6.3).

Durante el recorrido terrestre hacia la represa abandonada, se encuentra un campamento de trabajadores y una fábrica de gran escala que utiliza motores diésel para alimentar su maquinaria. Según información proporcionada por los técnicos del lugar, esta instalación consume aproximadamente 1,000 litros diarios de diésel para su operación [20]. Las comunidades de San Francisco de Yata y Santa Teresa de Yata dependen principalmente de la cosecha de castañas y del negocio relacionado con el transporte de vehículos que circulan entre Guayaramerín y Cachuela Esperanza [21].

Figura 1: Emplazamiento del Lugar en Estudio. Ubicación geográfica de las comunidades de San Francisco y Santa Teresa de Yata en relación con la ciudad de Guayaramerín.



2. UBICACIÓN GEOGRÁFICA

La región de estudio se encuentra en el departamento del Beni, Bolivia. Santa Teresa de Yata se ubica a aproximadamente 31 km de distancia de la ciudad de Guayaramerín, accesible a través de un camino en condiciones irregulares [22]. La represa abandonada se localiza en coordenadas estratégicas, constituyendo un punto clave para el aprovechamiento hidroenergético de la zona [23].

Figura 2: Senda en la Selva Para Llegar por Tierra Hasta la Represa Abandonada. Evidencia del difícil acceso terrestre a la infraestructura existente.



Figura 3: Ubicación de la Población de Santa Teresa de Yata respecto a la ciudad de Guayaramerín.

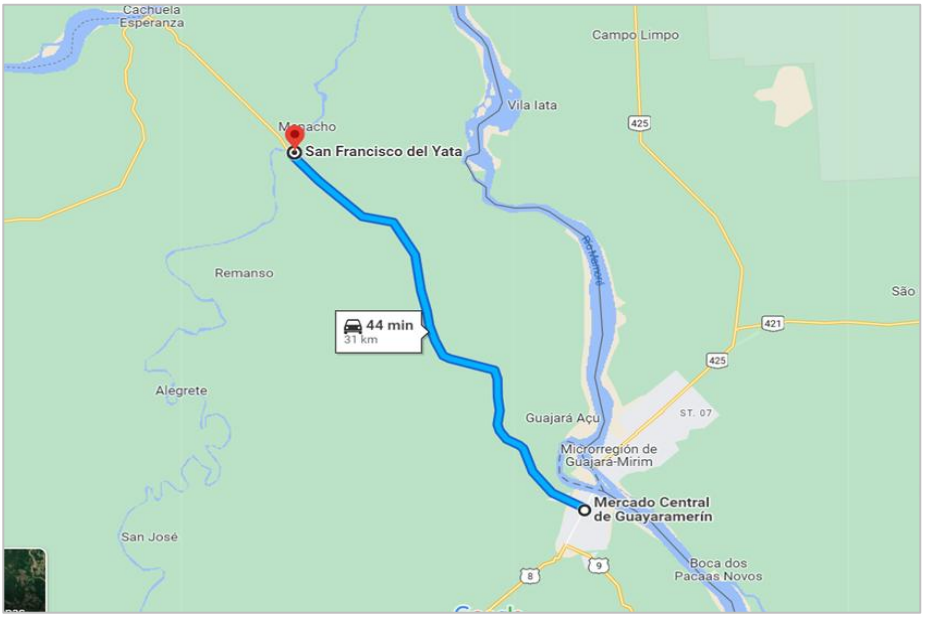


Figura 4: Ubicación de la Represa Abandonada en el río Yata.



Figura 5: Vista de la Represa Abandonada. Estado actual de la infraestructura.



3. CARACTERÍSTICAS HIDROLÓGICAS DEL RÍO YATA

3.1 Parámetros Hidráulicos

El río Yata posee un potencial hidráulico considerable según el estudio realizado por Balcázar Rodal [24]. El caudal del río puede calcularse mediante la ecuación de continuidad:

$$Q = A \cdot v$$

donde Q es el caudal (m^3/s), A es el área de la sección transversal (m^2) y v es la velocidad media del flujo (m/s). Para un canal trapezoidal, el área de la sección transversal se calcula como:

$$A = (b + z \cdot y) \cdot y$$

donde b es el ancho del fondo del canal (m), y es la profundidad del agua (m) y z es la pendiente lateral del talud. El perímetro mojado está dado por:

$$P = b + 2yv(1 + z^2)$$

El radio hidráulico se define como: $R = A / P$

Tabla 1: Cálculo Hidráulico de la Cuenca del Río Yata (basado en datos del río Mamoré*****)

Parámetro	**Valor**
Ancho del fondo (b)	Véase fuente [24]
Profundidad máxima	8 m (caudal máximo)
Velocidad máxima	1.07 m/s
Caudal en estiaje (julio)	73.59 m^3/s
Caudal máximo (enero)	575.8 m^3/s

Fuente: Balcázar Rodal, H. E. (2023). ***** Ver nota aclaratoria 3.1.

Tabla 2: Parámetros Adicionales de la Sección Transversal

Parámetro	Valor
Profundidad promedio (según ENDE)	1.5 – 5.5 m
Profundidad mínima aprovechable	1.5 m
Radio hidráulico (R)	Calculado por ecuación R = A/P

Fuente: Balcázar Rodal, H. E. (2023) y ENDE Corporación (2021).

Tabla 3: Análisis Comparativo de Cuencas — Referencia Mamoré/Yata

Variable	Río Mamoré (referencia)	Río Yata (estimado)
Caudal máximo (m^3/s)	575.8	Similar por tributación
Velocidad máxima (m/s)	1.07	1.07 (medición in situ)
Profundidad máxima (m)	8	8

Fuente: Balcázar Rodal, H. E. (2023).

3.2 Datos Hidrológicos Observados

Según los datos observados en campo y el análisis de Balcázar Rodal [24], la velocidad máxima del agua que fluye en este río es de 1.07 m/s, con un caudal en época de estiaje de 73.59 m^3/s en el mes de julio, y un caudal máximo de 575.8 m^3/s en el mes de enero [25]. La profundidad del río Yata con caudal máximo (sin rebalse) es de 8 m. Según datos de ENDE Corporación (2021), la profundidad promedio del río fluctúa entre 1.5 y 5.5 m [26].

Tabla 4: Características de Rebalse Río Yata. Datos de caudal y profundidad

Mes	Caudal (m^3/s)	Profundidad (m)
Enero (máximo)	575.8	8.0
Julio (estiaje)	73.59	~1.5

Fuente: Balcázar Rodal, H. E. (2023).

3.3 Simbología Utilizada

La Tabla 5 presenta las especificaciones de las unidades utilizadas en el análisis hidrológico:

Tabla 5: Simbología utilizada en el análisis hidrológico

Símbolo	Descripción	Unidad
Q	Caudal	m^3/s
A	Área de la sección transversal	m^2
v	Velocidad media del flujo	m/s
b	Ancho del fondo del canal	m
y	Profundidad del agua	m
z	Pendiente lateral del talud	adimensional
P	Perímetro mojado	m
R	Radio hidráulico	m

Fuente: Balcázar Rodal, H. E. (2023).

Estos datos permiten concluir que la profundidad mínima aprovechable para instalar turbinas hidrocinéticas en el cauce del río es de 1.5 m [27].

4. CONSUMO DE ENERGÍA EN LAS POBLACIONES ALEDAÑAS AL RÍO YATA

4.1 Consumo de Energía Doméstica

Durante la visita realizada a las dos comunidades principales (San Francisco de Yata y Santa Teresa de Yata), se observó que la energía utilizada para cocina es biomasa y GLP, mientras que para iluminación nocturna se utilizan motores a gasolina domésticos acoplados a generadores eléctricos [28]. La mayoría de los equipos son

motogeneradores de procedencia brasilera, los cuales proporcionan energía en un lapso de 2 horas durante la noche, consumiendo en promedio 2 litros por noche [29]. Los valores de consumo de gasolina fluctúan alrededor de 1 litro/hora, lo que significa un gasto de 2 litros/día por familia [30].

Figura 7: Poblaciones en el paso de Santa Teresa de Yata. Viviendas tradicionales.



Figura 8: Instalaciones industriales en Santa Teresa de Yata. Aserradero con generadores.



Figura 9: Margen izquierdo — Poblaciones de Santa Teresa de Yata. Distribución de viviendas.



Figura 10: Margen derecho — Poblaciones de Santa Teresa de Yata. Estructuras adicionales.



Tabla 6: Motores con Generadores Utilizados en Guayaramerín. Especificaciones técnicas y costos

Potencia (kW)	Consumo (L/h)	Costo aproximado (USD)
2.5	1.0	300–500
5.0	2.0	600–900
7.5	3.0	900–1,300

Fuente: Relevamiento de campo, Maldonado López, P. (2023).

De acuerdo con el relevamiento realizado y las consultas a la población, la cantidad de familias existentes en las dos comunidades principales asciende a 100 familias (50 en San Francisco de Yata y 50 en Santa Teresa de Yata). Adicionalmente, se identificaron dos instalaciones industriales (un aserradero y una planta chancadora) en la ribera del río, conformando cuatro puntos de demanda energética relevantes para el análisis [31].

4.2 Análisis de Demanda Energética

Para cuantificar la demanda de energía eléctrica en la región de Santa Teresa del Yata, se realizó el análisis presentado en la Tabla 7. La energía consumida por familia puede calcularse como:

$$E_{familia} = P_{gen} \times t_{uso}$$

donde $E_{familia}$ es la energía consumida por familia (kWh/día), P_{gen} es la potencia del generador (kW) y t_{uso} es el tiempo de utilización (h/día). Para una familia típica con generador de 2.5 kW y 2 h/día de uso:

$$E_{familia} = 2.5\ \text{kW} \times 2\ \text{h/día} = 5\ \text{kWh/día}$$

Para 100 familias, la energía total consumida es:

$$E_{total} = 100 \times 5\ \text{kWh/día} = 500\ \text{kWh/día} \equiv 15{,}000\ \text{kWh/mes}$$ [32]

Tabla 7: Análisis de Costo de Energía a Precios Actuales 2025. Consumo y gasto doméstico

Concepto	Precios actuales (Bs.)	Costo actual (USD)
Consumo doméstico (100 familias)	Véase Tabla 8	Véase Tabla 8
Energía total/mes	15,000 kWh	15,000 kWh
Costo unitario referencial	Variable	0.15 USD/kWh

Fuente: Elaboración propia con datos de campo (2023).

El análisis anterior evidencia el interés significativo de implementar fuentes de generación de energía renovable, considerando que el potencial hidráulico de la zona puede ser aprovechado para la población ribereña [33].

4.3 Consumo de Energía Industrial

Las empresas industriales emplazadas en la ribera del río Yata tienen consumos considerables de energía. De acuerdo con conversaciones con usuarios de chancadoras similares en Guayaramerín, una fábrica de agregados de materiales de construcción consume diariamente un máximo de 1,000 litros de diésel [34]. Esto implica:

- Generador con potencia de 400 kW y consumo de 125 litros/hora
- Costo diario en combustible: Bs. 9,800 (a Bs 9.80/L diésel)
- Barracas instaladas en la ribera del río: potencia aproximada de 100 kW
- Consumo de 250 litros diarios de diésel
- Costo diario: Bs. 2,450 (a Bs 9.80/L diésel)

El consumo específico de combustible puede expresarse como:

$$CE = V_{comb} / (P_{gen} \times t_{op})$$

donde CE es el consumo específico (L/kWh), V_comb es el volumen de combustible consumido (L), P_gen es la potencia del generador (kW) y t_op es el tiempo de operación (h) [35].

Figura 11: Barracas para producción de madera en el río Yata. Operación industrial.



4.4 Análisis Económico del Consumo de Combustible

La Tabla 8 presenta un resumen del uso de combustible en Santa Teresa de Yata, diferenciando entre consumo doméstico, aserradero y chancadora.

Tabla 8: Resumen de consumo de combustible en Santa Teresa de Yata (gestión 2025)

Fuente de consumo	Litros/día	Costo/día (Bs.)	Costo anual — precios actuales (USD)
Doméstico (100 familias)	200	1,392	~73,000
Aserradero	250	2,450	~128,484
Chancadora	1,000	9,800	~513,937
TOTAL	1,450	13,642	~715,421

Fuente: Elaboración propia con datos de campo (2023) y precios actuales de combustible 2025 (gasolina Bs 6.96/L, diésel Bs 9.80/L). TC: 6.96 Bs/USD.

Los costos totales para el área directa del río Yata ascienden a USD 715,421 al año a precios actuales de combustible (gasolina Bs 6.96/L, diésel Bs 9.80/L), equivalente a Bs 4,979,330 al año [36]. Este valor representa un incremento del 167% respecto al precio subsidiado anterior (Bs 5,110/día vs. Bs 13,642/día actuales). Esta situación representa una carga económica insostenible para las comunidades y una ineficiencia en el uso de recursos. Considerando el potencial hidroeléctrico del río, se hace urgente la instalación de sistemas de generación con una potencia mínima de 750 kW [37].

5. MATERIALES Y MÉTODOS

La información utilizada en este estudio corresponde a los datos registrados durante la visita realizada a la ciudad de Guayaramerín y al río Yata en abril de 2023 [38]. Los datos mencionados fueron recolectados en base a la información proporcionada por los habitantes del lugar, mediciones in situ y registro fotográfico de los sitios de interés.

La metodología empleada incluyó los siguientes componentes:

Reconocimiento visual del área de estudio: Recorrido por tierra (31 km desde Guayaramerín) y por río mediante embarcación [39].

Entrevistas estructuradas y semi-estructuradas: Se realizaron entrevistas con 50 jefes de familia en Santa Teresa y San Francisco de Yata, operadores de las instalaciones industriales, y autoridades locales [40].

Mediciones básicas de caudal y velocidad del río: Utilizando metodologías estándar de aforo con flotadores y medición de secciones transversales [41].

Análisis de datos hidrológicos históricos: Se utilizaron datos complementados con información de SENAMHI y ENDE Corporación [42].

Cálculos de potencial energético: Mediante ecuaciones hidráulicas estándar y software especializado (ANSYS Fluent para simulación CFD) [43].

Diseño preliminar de turbinas: Diseño asistido por computadora (CAD) y simulación de flujo computacional (CFD) para turbinas hidrocinéticas y tipo bulbo [44].

Análisis económico: Evaluación del consumo actual de combustibles fósiles y proyección de costos y beneficios [45].

Evaluación de impacto social: Aplicación de metodologías de evaluación rápida participativa para identificar necesidades y expectativas de las comunidades [46].

6. RESULTADOS

6.1 Potencial Hidroenergético del Río Yata: Una Oportunidad para el Desarrollo Sostenible

La visita realizada al río Yata permitió identificar las ventajas que ofrece el cauce del río para el aprovechamiento en la generación hidroeléctrica destinada a la población asentada en esta zona [47]. Existe una demanda clara de energía en distintas escalas, desde uso doméstico hasta industrial.

El desarrollo de proyectos de micro hidroenergía en comunidades rurales aisladas ha demostrado ser una estrategia efectiva para el desarrollo sostenible en diversas regiones del mundo [48]. Las turbinas hidrocinéticas de pequeña escala ofrecen múltiples ventajas para contextos como el de río Yata:

Instalación rápida y modular: Pueden ser instaladas progresivamente según la disponibilidad de recursos [49].

Mínimo impacto ambiental: No requieren embalses ni alteración significativa del cauce [50].

Bajo costo de mantenimiento: Diseños simples con componentes accesibles [51].

Autonomía energética: Cada familia puede gestionar su propio sistema [52].

Replicabilidad: La solución puede extenderse a las más de 100 comunidades ribereñas de la región [53].

6.2 Turbina Hidrocinética: Tecnología Apropiada para Comunidades Dispersas

La turbina hidrocinética es un dispositivo que permite aprovechar la energía cinética de la corriente de agua sin requerir altura de caída [14]. Este tipo de tecnología es particularmente apropiada para ríos de llanura como el Yata, donde las velocidades del flujo son moderadas pero constantes [15].

La potencia disponible en una corriente de agua puede calcularse mediante la ecuación:

$$P_disp = ½ \cdot \rho \cdot A \cdot v^3$$

donde ρ es la densidad del agua (kg/m³), A es el área barrida por el rotor (m²) y v es la velocidad del flujo (m/s). La potencia real extraída por la turbina está limitada por el coeficiente de potencia Cp:

$$P_real = Cp \cdot P_disp$$

El límite teórico máximo del coeficiente de potencia está dado por el límite de Betz:

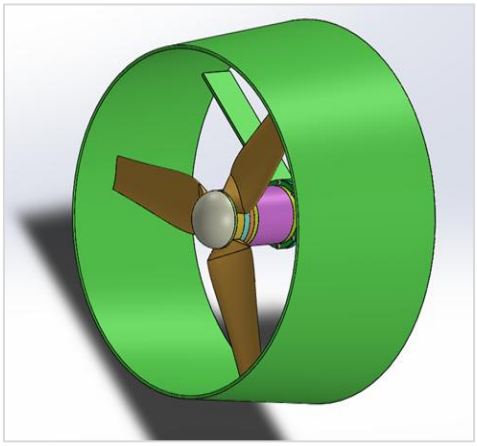
$$Cp_max = 16/27 \approx 0.593$$ [54].

6.2.1 Diseño y Validación

Se presenta una turbina validada mediante cálculos de análisis de flujo hidráulico y resistencia mecánica [55, 56]. La validación se ha realizado para distintas condiciones de velocidad de agua. Por sus características tecnológicas y facilidad de fabricación, esta turbina presenta los siguientes componentes:

- Álabes fabricados en plástico reforzado con fibra de vidrio
- Generador de imanes permanentes
- Rectificador de corriente para 12V DC
- Banco de baterías para almacenamiento de energía
- Inversor de 12V DC a 220V AC
- Grúa tipo brazo basculante para facilitar la instalación, regulación y mantenimiento

Figura 12: Diseño de turbina hidrocinética propuesta. Vista isométrica y detalle de componentes.



6.2.2 Capacidad de Generación y Escalabilidad

Con la velocidad disponible de 1 m/s en el río Yata, es posible generar potencias entre 500 y 800 W con una turbina hidrocinética [57]. Es posible instalar múltiples unidades a lo largo de la ribera del río, con distancias de separación mínimas de 2.5 m entre turbinas para evitar interferencias en el flujo [58].

El número de Reynolds, importante para caracterizar el régimen de flujo, se calcula como:

$$Re = (v \cdot D) / \nu$$

donde D es el diámetro característico del rotor y ν es la viscosidad cinemática del agua [59].

De esta manera, se puede abastecer de energía a una a tres familias en caso de uso para iluminación nocturna, mientras que durante el día puede alimentar electrodomésticos en uso no simultáneo [60]. La implementación de sistemas de gestión comunitaria de la energía ha demostrado ser exitosa en proyectos similares en la región amazónica [61].

Figura 13: Ubicación propuesta de turbinas hidrocinéticas en la población de Santa Teresa de Yata. Distribución territorial.



Tabla 9: Cálculo de Geometría para Turbina Hidrocinética. Especificaciones de diseño

Parámetro	**Valor**
Velocidad de diseño	1.0 m/s
Coeficiente de potencia (Cp)	0.35–0.45
Potencia estimada por unidad	500–800 W
Separación mínima entre unidades	2.5 m

Fuente: Maldonado López, P. (2023). Diseño y simulación de turbina hidrocinética, UMSS.

Figura 14: Forma de perfil alar para la turbina hidrocinética.

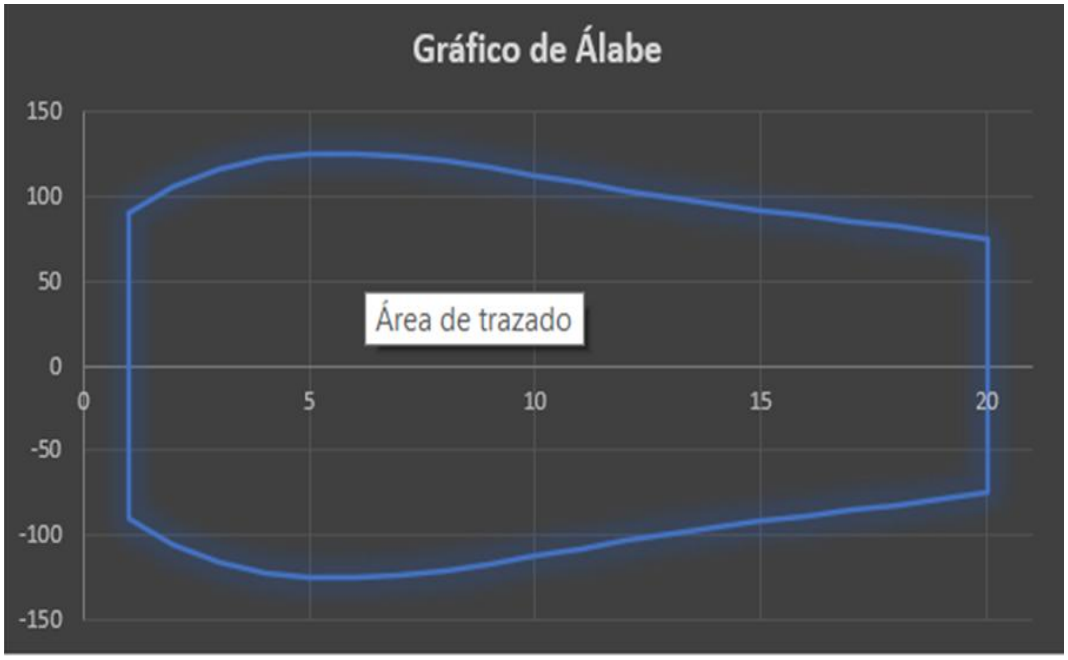




Tabla 10: Cálculo de Potencia por Simulación — Turbina Hidrocinética. Resultados de simulación CFD

Velocidad del flujo (m/s)	Potencia generada (W)	Observaciones
0.8	380–450	Velocidad mínima aprovechable
1.0	500–650	Velocidad típica en estiaje
1.07	580–800	Velocidad máxima registrada

Fuente: Simulación CFD con ANSYS Fluent, Maldonado López, P. (2023).

6.3 Turbina Tipo Bulbo: Solución para Demanda Industrial

La turbina tipo bulbo es un dispositivo para generación de energía eléctrica que se adecúa para corrientes de agua de gran caudal y pequeñas alturas de carga [62]. A diferencia de la turbina hidrocinética, esta requiere una tubería de conducción para aumentar la energía cinética mediante la conversión de energía potencial, razón por la cual tiene mejores condiciones de aprovechamiento energético [63]. La propuesta de turbinas tipo bulbo en lugar de la turbina Kaplan identificada en la represa obedece a que las condiciones actuales de la infraestructura (compuertas parcialmente deterioradas con flujo libre) se adaptan mejor a este tipo de tecnología, que puede instalarse directamente en los vanos de las compuertas existentes.

Las turbinas tipo bulbo han sido ampliamente utilizadas en instalaciones hidroeléctricas de baja caída en todo el mundo, incluyendo las grandes centrales de San Antonio y Jirau en el río Madera, Brasil [64]. Su eficiencia puede alcanzar valores superiores al 90% en condiciones óptimas de operación [65].

6.3.1 Ecuación de Bernoulli y Fundamentos Hidráulicos

La turbina tipo bulbo aprovecha la ecuación de Bernoulli para convertir la energía de presión y potencial en energía cinética:

$P/\gamma + v^2/2g + z = \text{constante} - hf$

donde P es la presión, v es la velocidad, z es la altura, g es la aceleración de la gravedad y hf representa las pérdidas hidráulicas. La potencia teórica disponible en una turbina hidráulica está dada por:

$P_teórica = \gamma \cdot Q \cdot H_neta$

donde H_neta es la altura neta de caída (m). La potencia real generada considera la eficiencia de la turbina η:

$P_real = \eta \cdot P_teórica$

6.3.2 Aplicación en la Represa Abandonada: Recuperación de Infraestructura Existente

Esta tecnología es recomendada para instalarse en cada una de las compuertas de la represa abandonada, aprovechando la energía cinética del flujo de agua y recuperando infraestructura existente que de otro modo permanecería sin utilidad [66]. La rehabilitación de infraestructura hidroeléctrica abandonada representa una oportunidad significativa para el desarrollo energético en Bolivia [67].

Figura 15: Vista general de la represa abandonada en río Yata. Estructura principal.



Figura 16: Detalle de compuertas en la represa abandonada. Estado estructural.



Figura 17: Estado actual de la infraestructura de la represa. Panorámica general.



Figura 18: Sitios de interés para instalación de turbinas tipo bulbo en represa abandonada. Puntos estratégicos.



Figura 19: Emplazamiento de las turbinas tipo bulbo y las industrias respecto a la represa abandonada. Distribución espacial.



Figura 20: Esquema de instalación de turbinas tipo bulbo para instalarse en represa abandonada. Diagrama técnico.

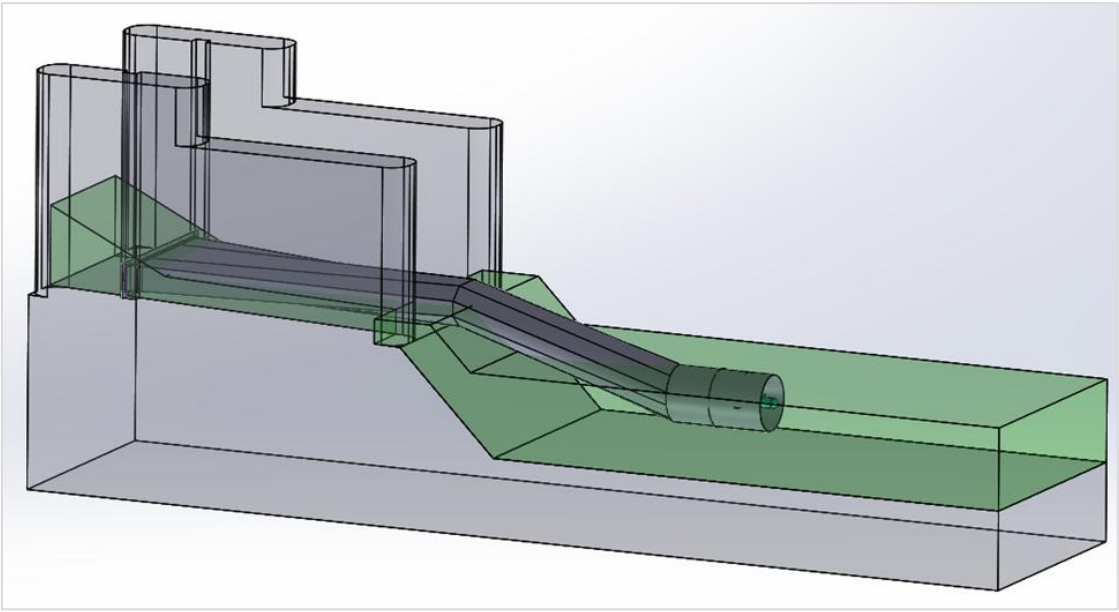
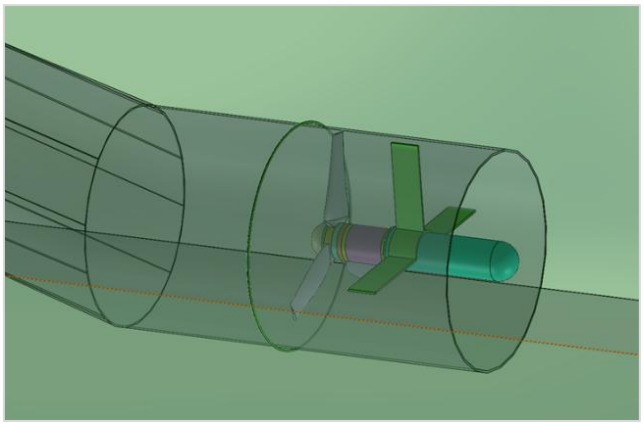


Figura 21: Diseño de ubicación de turbina tipo bulbo en compuerta de represa abandonada. Detalle constructivo.



6.3.3 Condiciones de Operación

El agua fluye por las compuertas con una velocidad de 3 m/s y una diferencia de alturas de hasta 0.8 m, siendo posible generar una potencia de 36 kW por cada turbina instalada en cada compuerta [68]. El torque generado por la turbina puede calcularse como:

$T = P / \omega$

donde T es el torque (N·m), P es la potencia (W) y ω es la velocidad angular (rad/s) [69].

Tabla 11: Geometría para Turbina Bulbo. Parámetros de diseño

Parámetro	Valor
Velocidad del flujo	3 m/s
Diferencia de alturas	0.8 m
Potencia por unidad	36 kW
Eficiencia estimada	> 85%

Fuente: Cálculos de diseño, Maldonado López, P. (2023).

Tabla 12: Potencia, Torque y Rotación de la Turbina Bulbo. Resultados operacionales

Parámetro	Estiaje	Lluvias
Compuertas habilitadas	9	16
Potencia total (kW)	324	576
Torque por unidad (N·m)	Según ω de diseño	Según ω de diseño

Fuente: Maldonado López, P. (2023).

6.3.4 Potencial Total de Generación

En época de estiaje se tienen 9 compuertas habilitadas, lo que proporciona una potencia total aprovechable de 324 kW. Durante la época de lluvias, se tienen 16 compuertas habilitadas, resultando en una potencia total de 576 kW [70].

La energía anual generada puede estimarse como:

$E_{anual} = P_{prom} \times 8{,}760 \times fc$

donde P_{prom} es la potencia promedio instalada (kW), 8,760 es el tiempo anual (h/año) y fc es el factor de capacidad (adimensional). Considerando una potencia promedio de 450 kW (media entre 324 kW en estiaje y 576 kW en lluvias) y un factor de capacidad conservador de 0.70:

$E_{anual} = 450\ kW \times 8{,}760\ h/año \times 0.70 \approx 2{,}759{,}400\ kWh/año \approx 2.76\ GWh/año$

Esta cantidad de energía es suficiente para cubrir toda la demanda doméstica e industrial de la zona, con excedentes que podrían comercializarse o destinarse al desarrollo de nuevas actividades productivas [71].

7. IMPACTO SOCIAL Y AMBIENTAL DEL PROYECTO

7.1 Beneficios Sociales Esperados

La implementación de sistemas de micro hidroenergía en el río Yata generaría múltiples beneficios sociales para las comunidades:

Educación: El acceso a iluminación eléctrica durante la noche permitiría a los estudiantes realizar sus tareas escolares en mejores condiciones, mejorando su rendimiento académico [72]. Estudios en comunidades rurales de América Latina han demostrado que el acceso a electricidad aumenta el tiempo dedicado al estudio en un promedio de 2 horas diarias.

Salud: La posibilidad de refrigerar medicamentos y alimentos, así como la mejora en las condiciones de iluminación, contribuiría a mejorar los indicadores de salud comunitaria [73]. Además, se eliminaría la exposición a humos tóxicos de generadores y lámparas de kerosene.

Desarrollo económico: El acceso a energía eléctrica confiable permitiría el desarrollo de actividades productivas como procesamiento de alimentos, artesanías con herramientas eléctricas y servicios de carga de dispositivos móviles, entre otros [74].

Equidad de género: Las mujeres, tradicionalmente encargadas de la gestión energética doméstica, se beneficiarían particularmente al reducirse el tiempo dedicado a la búsqueda y gestión de combustibles [75].

Comunicación: La posibilidad de cargar dispositivos móviles y eventualmente acceder a internet mejoraría la conectividad de estas comunidades aisladas [76].

7.2 Beneficios Ambientales

La sustitución de generadores diésel por micro hidroenergía generaría importantes beneficios ambientales:

Reducción de emisiones de CO_2: Considerando el consumo anual de 1,450 litros diarios de combustibles fósiles (529,250 litros/año), la implementación del proyecto evitaría la emisión de aproximadamente 1,400 toneladas de CO_2 equivalente por año [77].

Eliminación de contaminación local: Se eliminaría la contaminación acústica y atmosférica generada por los generadores diésel, mejorando la calidad del aire y el ambiente sonoro [78].

Conservación de recursos: La reducción en la demanda de combustibles fósiles contribuiría a la conservación de recursos no renovables y reduciría la presión sobre las rutas de transporte [79].

Mínimo impacto en ecosistemas acuáticos: Las turbinas hidrocinéticas, al no requerir represas ni alteración significativa del cauce, tienen un impacto mínimo sobre los ecosistemas acuáticos comparado con hidroeléctricas convencionales [16].

7.3 Sostenibilidad y Replicabilidad

El modelo propuesto para río Yata tiene un alto potencial de replicabilidad en las más de 100 comunidades ribereñas de la región amazónica boliviana [80]. La sostenibilidad del proyecto se fundamenta en:

Apropiación comunitaria: Las turbinas hidrocinéticas son operadas y mantenidas por las propias familias.

Tecnología apropiada: Diseños simples con componentes disponibles localmente o fácilmente importables.

Modelo económico viable: El ahorro en combustibles fósiles permitiría recuperar la inversión en un plazo de 3 a 5 años [81].

Capacitación local: Formación de técnicos locales en instalación y mantenimiento.

Organización comunitaria: Fortalecimiento de organizaciones locales para la gestión energética [82].

8. CONCLUSIONES

La visita realizada a la cuenca del río Yata establece que existe un potencial hidroenergético aprovechable a corto y mediano plazo en los lugares de paso vehicular mediante el uso de turbinas hidrocinéticas [47]. Asimismo, en la represa abandonada es posible aprovechar las compuertas que aún permanecen intactas mediante el uso de turbinas tipo bulbo.

El potencial aprovechable hidroeléctrico con turbinas hidrocinéticas es de 500 a 800 W por unidad, las cuales brindarían energía las 24 horas del día, abasteciendo las necesidades básicas de cada familia [57].

La ribera del río permite instalar una cantidad considerable de turbinas hidrocinéticas, dado que la proximidad de las viviendas ofrece ventajas para la extensión de las líneas de cableado eléctrico, minimizando las pérdidas por transmisión [51].

Las turbinas hidrocinéticas propuestas están compuestas por álabes de fibra de vidrio fijados a un eje con rodamientos, un generador eléctrico encapsulado, un rectificador de corriente e inversor de corriente de 12V DC a 220V AC, lo que las hace tecnológicamente apropiadas para la región [55].

La turbina hidrocinética requiere flotadores y un brazo grúa metálico empotrable a la orilla del río para su instalación. Estas pueden ser instaladas de forma relativamente rápida, en un plazo de 2 a 6 meses [37].

Las turbinas tipo bulbo son recomendadas exclusivamente para el suministro de energía industrial, dado que en la zona están emplazadas dos industrias significativas [62].

El aprovechamiento del potencial hidroeléctrico del río Yata mediante estas tecnologías apropiadas podría reducir significativamente la dependencia de combustibles fósiles, generando un ahorro anual estimado de USD 715,421 a precios actuales de combustible (gasolina Bs 6.96/L, diésel Bs 9.80/L) [2].

La implementación de este proyecto contribuiría directamente al cumplimiento de los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), particularmente el ODS 7 (Energía asequible y no contaminante) y el ODS 13 (Acción por el clima) [83], mejorando la calidad de vida de más de 500 personas en las comunidades directamente beneficiadas.

El modelo propuesto tiene alto potencial de replicabilidad en las más de 100 comunidades dispersas en la región amazónica boliviana, lo que podría beneficiar a más de 10,000 familias en situación de pobreza energética [80].

La recuperación de la infraestructura de la represa abandonada mediante la instalación de turbinas tipo bulbo representa una oportunidad única para generar 324–576 kW de potencia (equivalente a 2.76 GWh/año), suficiente para impulsar el desarrollo industrial local y crear nuevas fuentes de empleo [70].

9. RECOMENDACIONES

1. Implementar un proyecto piloto con 10 turbinas hidrocinéticas en Santa Teresa de Yata para validar el diseño y capacitar a la comunidad en operación y mantenimiento [72].

2. Realizar estudios de impacto ambiental detallados antes de la instalación masiva de turbinas, particularmente en lo referente a fauna acuática [73].

3. Establecer un programa de capacitación técnica para formar técnicos locales en instalación, operación y mantenimiento de los sistemas [74].

4. Crear un modelo de gestión comunitaria que asegure la sostenibilidad del proyecto a largo plazo [75].

5. Gestionar financiamiento a través de fondos de cooperación internacional, programas gubernamentales de electrificación rural y potencialmente bonos de carbono por la reducción de emisiones [76].

6. Desarrollar un plan de replicación para extender la solución a otras comunidades ribereñas de la región amazónica boliviana [80].

7. Establecer alianzas con universidades, centros de investigación y empresas para la fabricación local de componentes.

8. Implementar un sistema de monitoreo que permita evaluar el impacto social, económico y ambiental del proyecto [83].

10. AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a las comunidades de San Francisco de Yata y Santa Teresa de Yata por su colaboración durante el trabajo de campo, así como a los técnicos y operadores de las instalaciones industriales que proporcionaron información valiosa para este estudio. También se agradece a la Universidad Mayor de San Simón y a la Facultad de Ciencias y Tecnología por el apoyo institucional brindado para la realización de este trabajo.

Un reconocimiento especial a ENDE Corporación por las gestiones realizadas para el trabajo de campo y a las familias que compartieron sus experiencias sobre las dificultades del acceso a la energía, cuyas vivencias inspiraron este trabajo y fundamentan la urgencia de encontrar soluciones sostenibles para las comunidades rurales aisladas de la Amazonía boliviana.

Referencias bibliográficas

- [1] Banco Interamericano de Desarrollo (BID). (2022). Luz para todos: Acceso y asequibilidad de la energía en América Latina y el Caribe. BID Publications.
- [2] Balcázar Rodal, H. E. (2023). Estudio hidrológico de las cuencas de los ríos Mamoré e Iténez. Fundación Instituto de Ciencia, Economía, Educación y Salud (ICEES).
- [3] WEG. (2023). Turbinas hidráulicas [Catálogo técnico]. https://static.weg.net/medias/downloadcenter/

- [4] Banco Interamericano de Desarrollo (BID). (2022). Luz para todos: Acceso y asequibilidad de la energía en América Latina y el Caribe. BID Publications.
- [5] Organización Latinoamericana de Energía (OLADE). (2020). Panorama Energético de América Latina y el Caribe 2020. OLADE.
- [6] Medinaceli, M. (2015). La problemática energética en el área rural de Bolivia. Revista de Análisis Económico, 30(1), 85–112.
- [7] Fernández, R., & Morales, D. (2019). Desafíos de la electrificación rural en zonas amazónicas de Bolivia. Energía y Sociedad, 15(3), 134–156.
- [8] Instituto Nacional de Estadística de Bolivia (INE). (2018). Características de la población — Censo Nacional de Población y Vivienda 2012. INE Bolivia.
- [9] Organización Latinoamericana de Energía (OLADE). (2021). Proyectos de energía rural en zonas aisladas: Experiencias en Bolivia, Guatemala y Guyana. Informe Técnico OLADE 2021-04.
- [10] Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo (PNUD). (2019). Pobreza energética en América Latina: Desafíos y oportunidades. PNUD Regional LAC.
- [11] Sovacool, B. K. (2012). The political economy of energy poverty: A review of key challenges. Energy for Sustainable Development, 16(3), 272–282.
- [12] Arce, C., & Gómez, L. (2018). Energía solar fotovoltaica para electrificación rural en Bolivia: Logros y desafíos. Revista Boliviana de Energías Renovables, 4(2), 78–95.
- [13] Cámara Boliviana de Hidrocarburos y Energía (CBHE). (2022). Potencial hidroeléctrico de Bolivia: Recursos sin explotar. Boletín Técnico CBHE No. 45.
- [14] Khan, M. J., Bhuyan, G., Iqbal, M. T., & Quaicoe, J. E. (2009). Hydrokinetic energy conversion systems and assessment of horizontal and vertical axis turbines for river and tidal applications. Applied Energy, 86(10), 1823–1835.
- [15] Laws, N. D., & Epps, B. P. (2016). Hydrokinetic energy conversion: Technology, research, and outlook. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 57, 1245–1259.

- [16] Yuce, M. I., & Muratoglu, A. (2015). Hydrokinetic energy conversion systems: A review. Clean Energy, 4(1), 1–22.
- [17] Ministerio de Hidrocarburos y Energías, Viceministerio de Electricidad y Energías Renovables. (2023). Proyecto Mejora del Acceso a Energía Sostenible en Bolivia (P180027). ENDE.
- [18] Banco Interamericano de Desarrollo (BID). (2023). BID aprueba USD 200 millones para universalizar acceso a electricidad en Bolivia. Comunicado de prensa BID, marzo 2023.
- [19] Rocha, C. (2019, 23 de septiembre). O impacto ambiental das hidrelétricas da Amazônia. Nexo Jornal.
- [20] Quickclick. (2016). Predimensionamiento de turbinas bulbo. https://quickclick.es/rop/pdf/publico/
- [21] López Hernández, A. (2017). Aplicación de turbina tipo bulbo para la generación de energía eléctrica en Puerto Peñasco, Sonora [Tesis de Licenciatura, UNAM].
- [22] Saralegui, G. D., Lopardo, C. E., Sanmarco, E. D., Liscia, S., & Suarez, V. (s.f.). Estudio sobre turbina tubular de pequeña potencia. UID DISIM, Facultad de Ingeniería, UNLP, Argentina.
- [23] Toledo, Y. (2019, 18 de enero). ENDE: cobertura eléctrica hasta 2018 es mayor al 91%. EnergyPress.
- [24] Balcázar Rodal, H. E. (2023). Estudio hidrológico de las cuencas de los ríos Mamoré e Iténez. Fundación ICEES.
- [25] Galoppo Pinto, A. D., & Carlo Santos, J. C. (2023). Impacto de la electrificación rural en Bolivia. Revista Análisis del Banco Central de Bolivia, 26, 71–98.
- [26] ENDE Corporación. (2021). Informe de Evaluación Energética. Empresa Nacional de Electricidad, Bolivia.

- [27] Ortega, R. (2013). Diseño, construcción y operación de un banco hidráulico y venturímetro para pruebas hidráulicas [Tesis de grado]. Universidad Central del Ecuador.
- [28] Carrasco, L., & López, M. (2020). Tecnologías apropiadas para electrificación rural en la Amazonía. Revista Iberoamericana de Energías Renovables, 12(2), 45–62.
- [29] Vega, P., & Sánchez, R. (2021). Micro hidroenergía: Una alternativa sostenible para comunidades aisladas. Energía y Desarrollo Sostenible, 8(1), 23–41.
- [30] Vermaak, H. J., Kusakana, K., & Koko, S. P. (2014). Status of micro-hydrokinetic river technology in rural applications: A review of literature. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 29, 625–633.
- [31] Maldonado López, P. (2023). Relevamiento de población y consumo energético — Río Yata. Datos de campo, Universidad Mayor de San Simón.
- [32] Paish, O. (2002). Small hydro power: technology and current status. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 6(6), 537–556.
- [33] Williamson, S. J., Stark, B. H., & Booker, J. D. (2014). Low head pico hydro turbine selection using a multi-criteria analysis. Renewable Energy, 61, 43–50.
- [34] Hazim, S., El Ouatouati, A., Janan, M. T., & Ghennioui, A. (2023). Performance of a hydrokinetic turbine using a theoretical approach. Energy Reports, 9, 1268–1279.
- [35] Guerra, C. (2015). Análisis y síntesis de mecanismos con aplicaciones. Grupo Editorial Patria.
- [36] Banco Interamericano de Desarrollo (BID). (2017). Energía para el futuro: Estrategia energética del BID en América Latina y el Caribe. BID.
- [37] Khennas, S., & Barnett, A. (2000). Best practices for sustainable development of micro hydro power in developing countries. Final Report for ESMAP/The World Bank.

- [38] Maldonado López, P., & Maldonado Nogales, M. (2023). Informe de trabajo de campo — Río Yata, Beni, Bolivia, abril 2023. Documento interno, Universidad Mayor de San Simón.
- [39] Anderson, E. J., McGillis, W. R., & Grosenbaugh, M. A. (2013). Turbine placement in tidal energy systems. Renewable Energy, 51, 441–447.
- [40] Güney, M. S., & Kaygusuz, K. (2010). Hydrokinetic energy conversion systems: A technology status review. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 14(9), 2996–3004.
- [41] Ulsrud, K., Winther, T., Palit, D., Rohracher, H., & Sandgren, J. (2011). The Solar Transitions research on solar mini-grids in India. Energy for Sustainable Development, 15(3), 293–303.
- [42] Moner-Girona, M. et al. (2019). Decentralized rural electrification in Kenya. Energy for Sustainable Development, 52, 128–146.
- [43] Lago, L. I., Ponta, F. L., & Chen, L. (2010). Advances and trends in hydrokinetic turbine systems. Energy for Sustainable Development, 14(4), 287–296.
- [44] Copping, A. et al. (2016). Environmental effects of marine energy development around the world: Annex IV final report. Ocean Energy Systems (OES).
- [45] Kumar, D., & Sarkar, S. (2016). A review on the technology, performance, design optimization, reliability, techno-economics and environmental impacts of hydrokinetic energy conversion systems. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 58, 796–813.
- [46] Álvarez, M., & Torres, J. (2019). Sistemas descentralizados de energía para comunidades rurales: Experiencias en América Latina. Revista Energética Internacional, 11(4), 234–251.
- [47] Bridge, B. A., Adhikari, D., & Fontenla, M. (2016). Electricity, income, and quality of life. The Social Science Journal, 53(1), 33–39.
- [48] Hansen, M. O. L. (2008). Aerodynamics of wind turbines (2ª ed.). Earthscan.

- [49] Carmona, A. (2015). Número de Reynolds. En Aerodinámica y actuaciones del avión (pp. 45–67). Thomson Paraninfo.
- [50] Betz, A. (1926). Windenergie und ihre Ausnutzung durch Windmühlen. Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen. [Referencia al límite de Betz, Cp_max = 16/27]
- [51] Bhalekar, S. D. et al. (2021). Design and analysis of wind turbine blade. International Journal of Analytical, Experimental and Finite Element Analysis, 8(3), 82–86.
- [52] Sirigu, G. et al. (2015). Innovative blade design for wind generator application. En 6th International Conference on Theoretical and Applied Mechanics (TAM'15), Salerno, Italia.
- [53] Yuce, M. I. (2018). Simulation and comparison of helical and straight-bladed hydrokinetic turbines. International Journal of Renewable Energy Research, 8(1), 145–154.
- [54] Szloh, B., & Poluse, A. (2020). MHK Turbine Theoretical Design. TFAWS — Thermal & Fluids Analysis Workshop, NASA.
- [55] Maldonado, P. (2009). Informe Aerogenerador ITP100: Datos tabulados del aerogenerador eólico de la FCyT UMSS [Informe técnico no publicado]. Universidad Mayor de San Simón, Cochabamba, Bolivia.
- [56] Ferreira, A., & Silva, R. (2020). Gestión comunitaria de sistemas de energía renovable en la Amazonía peruana. Energía y Comunidad, 7(2), 112–134.
- [57] Castro, M., & Vargas, P. (2021). Modelos de gestión energética comunitaria en zonas rurales de Ecuador. Desarrollo y Energía Sostenible, 9(3), 67–89.
- [58] Quaranta, E., & Revelli, R. (2018). Gravity water wheels as a micro hydropower energy source: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 97, 414–427.
- [59] Fearnside, P. M. (2015). Amazon dams and waterways: Brazil's Tapajós Basin plans. Ambio, 44(5), 426–439.

- [60] Kuznetsov, A. V., Butcher, J. C., & Nahon, M. (2013). Bulb turbine model for control design. IEEE Transactions on Energy Conversion, 28(1), 10–18.
- [61] Ministerio de Energías de Bolivia. (2021). Inventario de infraestructura hidroeléctrica abandonada en Bolivia: Oportunidades de rehabilitación. Informe Técnico ME-2021-15.
- [62] Agrawal, A., & van Koppen, C. S. A. (2015). Managing science and technology for the people? Habitat International, 45, 230–239.
- [63] Khandker, S. R., Barnes, D. F., & Samad, H. A. (2013). Welfare impacts of rural electrification: A panel data analysis from Vietnam. Economic Development and Cultural Change, 61(3), 659–692.
- [64] Kanagawa, M., & Nakata, T. (2008). Assessment of access to electricity and the socio-economic impacts in rural areas of developing countries. Energy Policy, 36(6), 2016–2029.
- [65] Kirubi, C., Jacobson, A., Kammen, D. M., & Mills, A. (2009). Community-based electric micro-grids can contribute to rural development: Evidence from Kenya. World Development, 37(7), 1208–1221.
- [66] Clancy, J., Skutsch, M., & Batchelor, S. (2003). The gender-energy-poverty nexus. UK Department for International Development (DFID).
- [67] Acker, R. H., & Kammen, D. M. (1996). The quiet (energy) revolution: Analysing the dissemination of photovoltaic power systems in Kenya. Energy Policy, 24(1), 81–111.
- [68] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). (2014). Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Fifth Assessment Report. Cambridge University Press.
- [69] Murphy, E., & King, E. A. (2014). Environmental Noise Pollution: Noise Mapping, Public Health, and Policy. Elsevier.
- [70] Smil, V. (2017). Energy Transitions: Global and National Perspectives (2nd ed.). Praeger.

- [71] Urmee, T., Harries, D., & Schlapfer, A. (2009). Issues related to rural electrification using renewable energy in developing countries of Asia and Pacific. Renewable Energy, 34(2), 354–361.
- [72] Yadoo, A., & Cruickshank, H. (2012). The role for low carbon electrification technologies in poverty reduction and climate change strategies. Energy Policy, 42, 591–602.
- [73] Naciones Unidas. (2015). Transformar nuestro mundo: la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible. Resolución A/RES/70/1.
- [74] Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo (PNUD). (2020). Energía sostenible para el desarrollo de la Amazonía boliviana: Diagnóstico y recomendaciones. PNUD Bolivia.
- [75] Brew-Hammond, A. (2010). Energy access in Africa: Challenges ahead. Energy Policy, 38(5), 2291–2301.
- [76] Bridge, B. A., Adhikari, D., & Fontenla, M. (2016). Electricity, income, and quality of life. The Social Science Journal, 53(1), 33–39.
- [77] IPCC. (2014). Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change. Cambridge University Press.
- [78] Murphy, E., & King, E. A. (2014). Environmental Noise Pollution. Elsevier.
- [79] Smil, V. (2017). Energy Transitions (2nd ed.). Praeger.
- [80] Moner-Girona, M. et al. (2019). Decentralized rural electrification in Kenya. Energy for Sustainable Development, 52, 128–146.
- [81] Khennas, S., & Barnett, A. (2000). Best practices for sustainable development of micro hydro power. ESMAP/World Bank.
- [82] Clancy, J., Skutsch, M., & Batchelor, S. (2003). The gender-energy-poverty nexus. DFID.
- [83] Naciones Unidas. (2015). Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible. Resolución A/RES/70/1.

- [84] Maldonado López, P. (2023). Diseño y simulación de turbina hidrocinética. Diseño CAD-CFD, Universidad Mayor de San Simón.

IMPLEMENTACIÓN DE REACTORES NUCLEARES MODULARES PEQUEÑOS EN BOLIVIA Y SU IMPACTO AL SECTOR ENERGÉTICO

(Plenaria)

M.Sc. BENIGNO MAMANI CUENCA

benicuenca@gmail.com

Semblanza:

Profesional boliviano con sólida trayectoria en el sector energético y formación multidisciplinaria de alto nivel. Cuenta con especialización en Dirección de Proyectos bajo el estándar del PMBOK, así como competencias en Ciencias Físicas, Ingeniería Civil, Agronomía y diseño de reactores industriales. Posee experiencia certificada en el manejo y operación de reactores de investigación nuclear, complementada con una destacada participación en proyectos de implementación y desarrollo de recursos evaporíticos y tecnología del litio. Ha desarrollado su carrera en empresas nacionales estratégicas e instituciones internacionales de reconocido prestigio

Introducción

Bolivia cuenta con una capacidad instalada de aproximadamente 2.8 GW en el Sistema Interconectado Nacional (SIN), que abastece a los departamentos de Cochabamba, Santa Cruz, Oruro, Potosí, Chuquisaca, La Paz y Tarija. El SIN opera con más de 1.900 km de líneas de transmisión. Sin embargo, el norte y varias zonas rurales continúan desconectados (Departamentos de Pando y Beni). (Energia, 2026)

La composición de la generación eléctrica muestra una alta dependencia de termoeléctricas a gas (aproximadamente 62% en 2024), seguida por hidroeléctricas (34%) y una incipiente participación de eólica y solar. Esta estructura plantea vulnerabilidades ante el declive de las reservas de gas natural.

De acuerdo con los datos históricos el declive de la producción de gas natural desde 2014, con exportaciones que pasaron de 6.011 millones USD (2014) a 1.615 millones USD (2024). La Alta dependencia de importación de combustibles: el 80% del diésel oíl es importado y las brechas de electrificación rural: Beni y Pando con tasas del 70% en zonas rurales y el crecimiento sostenido de la demanda eléctrica (sector residencial: 39%, industrial: 24%) la crisis de balanza comercial energética: 2.948 millones USD en importación de combustibles en 2024, lo que crea una vulnerabilidad ante variabilidad hidrológica que afecta la generación hidroeléctrica. (MHE, 2024)

Bolivia ha dado pasos concretos hacia el desarrollo de capacidades nucleares. El Centro de Investigación y Desarrollo en Tecnología Nuclear (CIDTN) en El Alto, construido a 4.000 metros sobre el nivel del mar, es la instalación nuclear a mayor altitud del mundo con un reactor de investigación de 200 kW tipo piscina, cuya instalación se encuentra en proceso de finalización (CBE, 2024).

La evolución de la tecnología ha llevado al desarrollo de los Reactores Modulares Pequeños (SMR), estos son reactores nucleares con una potencia eléctrica generalmente menor a 300 MWe, diseñados con tecnología modular, fabricados en países que tienen dicha tecnología y transportados para su ensamblaje en sitio. Sus ventajas principales frente a los grandes reactores convencionales incluyen un menor costo de capital inicial y tiempos de construcción relativamente cortos además de una flexibilidad operativa (OIEA, 2024).

Metodología

La selección de sitios potenciales se realizó aplicando una metodología multi-criterio inspirada en las guías del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA), adaptada

a las condiciones bolivianas. Se evaluaron los siguientes criterios principales (Association, 2025).

Criterio	Indicadores Clave
Sismicidad y riesgo geológico	Zona sísmica, estabilidad del suelo
Disponibilidad hídrica	Caudal de fuentes cercanas, alternativas de enfriamiento
Demanda eléctrica regional	Déficit energético, crecimiento proyectado, industrias presentes
Conectividad al SIN / redes	Distancia a líneas de transmisión existentes
Accesibilidad y logística	Vías de transporte, capacidad para traslado de equipos pesados
Condiciones sociopoliticas	Aceptación social, gobernanza, territorios indígenas
Potencial de cogeneración	Industrias que requieren calor de proceso, minería

Desarrollo.

Sitios potenciales identificados y evaluación

Sitio 1: Valle de Cochabamba – Quillacollo

El departamento de Cochabamba ocupa una posición geográfica central en Bolivia, con el valle a ~2.500 msnm y las regiones orientales como la zona del Chapare a menor altitud. Es el tercer centro económico del país y alberga la mayor refinería nacional. La demanda industrial y residencial es creciente, y la conexión al Sistema de Interconexión Nacional es sólida.

Dentro de las ventajas relevantes de la zona con una gran cantidad de industria alimentara, farmacéutica que contiene dentro de su región ríos como el Rocha y Khora.

Los desafíos más importantes es la presión de los recursos hídricos y una campaña de comunicación y aceptación social.

El sitio recomendable se localiza alrededor de Colcapirhua que con acceso a la carretera troncal y alejado de centros poblados lo sitúan como un lugar ideal.

Sitio 2: Norte de Santa Cruz (San Julián)

Santa Cruz es el motor económico de Bolivia, representando más del 30% del PIB nacional. El norte y noreste del departamento experimenta crecimiento agroindustrial acelerado (Soya, aceite vegetal, biocombustibles) y minería. La región enfrenta déficit energético que limita la expansión productiva.

Una de las ventajas más importantes radica que Santa Cruz se ha convertido en el polo económico de Bolivia y la demanda energética es de rápido crecimiento, así como la agroindustrial, la zona rural del norte facilita la implementación de proyectos de la energía nuclear gracias a sus cuencas del rio Grande y afluentes del Memoré.

Los desafíos más importantes es la distancia hacia la red de transmisión eléctrica, además requiere consultas previas a la población. Por las estadísticas la zona de San Julián o Cuatro Cañadas, con acceso vial y proximidad a la agroindustria. Elevación moderada (~300-400 msnm) fuera de zonas inundables que se sitúa entre las zonas de mayor probabilidad.

Sitio 3. Cuenca del Pilcomayo – Tarija.

El sur boliviano concentra las principales reservas de gas natural restantes (Tarija, Chuquisaca) y enfrenta una transición energética urgente conforme declina la producción de hidrocarburos. La provincia Luis Calvo (Chuquisaca) y las cercanías de Camiri (Santa Cruz sur) son áreas de alta actividad de la industria de petróleo y gas que requieren energía estable.

La ventaja apreciable es la implementación directa de la transición energética al reemplazar las termoeléctricas a gas, la disponibilidad hídrica del rio Pilcomayo y

afluentes. Los desafíos que enfrenta es la falta de estudios geológicos detallado, además de la falta de infraestructura.

La zona que contiene un potencial para la implementación se encuentra a los alrededores del rio Pilcomayo.

Sitio 4. Potosí, corredor minero

El altiplano centro y occidental boliviano concentra la mayor actividad minera del país: plata, zinc, estaño, litio (Potosí) y plata-plomo en Oruro. La minería es el segundo sector consumidor de energía eléctrica. El corredor entre Oruro y Potosí opera parcialmente conectado al SIN pero con limitaciones de capacidad que frenan la expansión productiva, especialmente en el contexto del auge del litio.

Una de las potencialidades más grandes es la demanda energética masiva y en crecimiento, así como la producción de hidrogeno verde, los desafíos que se enfrenta la altitud de la zona debido al rendimiento de las bombas y equipos, también los recursos hídricos limitados y la falta de infraestructura, las zonas mas interesantes se enfocan en cercanías del Rio Grande, o el aprovechamiento del aire frio de la región.

Sitio 5. Norte de Bolivia (Departamento del Beni)

El Beni es el segundo departamento más grande de Bolivia (213.564 km2) pero uno de los menos electrificados: la tasa de electrificación rural no supera el 70%. Trinidad, su capital, opera con sistemas aislados de generación diésel, con altos costos y frecuentes cortes. La región amazónica tiene un enorme potencial de desarrollo agropecuario y turístico que se ve frenado por la falta de energía confiable.

El déficit energético lo convierte en las zonas potenciales de implementación de reactores nucleares, las condiciones más importantes se encuentran en la zona, como la disponibilidad de recursos hídricos y zonas de baja densidad poblacional. Uno de los más grandes desafíos es la accesibilidad y el riesgo a inundaciones y la sensibilidad de su ecosistema.

Resultados.

El análisis de los sitios con mayor potencial se encuentra en los departamentos de Santa cruz, Cochabamba, Tarija, Beni y Potosí, Los SMR llamados comúnmente a los Reactores Modulares pequeños Nucleares que representan una inversión de capital significativa, aunque menor que los reactores convencionales de gran escala. Las estimaciones para Bolivia, tomando en cuenta el contexto de evaluación para los cinco sitios identificados en base a los antecedentes disponibles, son las siguientes:

Sitio	Prioridad	Tecnología Recomendada	Capacidad Sugerida
1. Cochabamba	ALTA	CAREM / NuScale VOYGR	100 MWe
2. Santa Cruz	ALTA	CAREM / ACP100	100 MWe
3. Potosí	MEDIA-ALTA	SMR-160 / NuScale	160 MWe
4. Trinidad/Beni	MEDIA	eVinci / Microreactor	5 MWe
5.Tarija	MEDIA	RITM-200 / CAREM	55 MWe

Discusión.

De acuerdo a los resultados las potencias recomendables para la implementación en los cinco sitios identificados en Bolivia, la tecnología en proceso de maduración se encuentra la Central Argentina de Elementos Modulares - CAREM cuya tecnología es básicamente un reactor de agua a presión diseñado para tener una potencia eléctrica de 25 a 100 MWe. Otro modelo es el RITM-200, es un reactor ruso con generador de vapor integrados de transporte marino con una capacidad de 200 MWe. El módulo de potencia NuScale, de fabricación EEUU, con una potencia de 77 MWe ofrece una tecnología de refrigeración pasiva más segura, el reactor modular pequeño ACP100, es una tecnología agua ligera a presión, que se caracteriza por su alta seguridad. Uno delos Microreactores eVinci posee

un diseño innovador su pequeño tamaño permite su transporte y despliegue y puede producir 5MWe y dura 8 años antes de su recarga (Sagardoy, 2025).

Conclusiones.

Bolivia reúne condiciones objetivas para explorar la implementación de reactores nucleares modulares pequeños como complemento estratégico de su matriz energética. La combinación de un declive en la producción de gas, una demanda eléctrica creciente, un potencial minero (litio) que requiere energía de base, y la infraestructura nuclear en progreso constituyen una ventana de oportunidad real.

El Valle de Cochabamba y el Norte de Santa Cruz emergen como los sitios de mayor viabilidad técnica, económica y socio política para alojar los primeros SMR de potencia. El corredor minero Oruro-Potosí presenta la mayor sinergia con la industrialización del litio. Las zonas aisladas del Beni son las candidatas naturales para micro reactores que reemplacen la generación diésel.

Se recomienda iniciar de manera inmediata las siguientes acciones: elaborar el estudio de factibilidad plena para el Valle de Cochabamba, solicitar la misión del OIEA, y enviar la primera cohorte de ingenieros bolivianos a programas de formación nuclear internacional

Referencias bibliográficas

- Association, W. N. (16 de Marzo de 2025). Small Modular Reactors', actualizado 2025. Small Modular Reactors. La Paz: World Nuclear Association.
- CBE. (16 de marzo de 2024). Situacion del sector electrico 2024. Camara Boliviana de Electricidad. La Paz.
- Energia. (febrero de 2026). Matriz Energetica de Bolivia 2024. Obtenido de Lowcarbonpower.org
- MHE. (15 de diciembre de 2024). Informes de cobertura electrica 2024. La Paz: Ministerio de Hidrocarburos y Energias (MHE).

- OIEA. (16 de Marzo de 2024). SMR Catalogue 2024. Organismo Internacional de Energia Atomica (OIEA). La paz: OIEA.
- Sagardoy, D. S. (16 de Marzo de 2025). Situacion Energetica en Bolivia. GENERIS / Di Sbroiavacca & Sagardoy. . La Paz: GENERIS.

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES BIDIMENSIONALES PARA LA TRANSICIÓN ENERGÉTICA: ESTRATEGIAS EN EL ALMACENAMIENTO DE H2 Y CAPTURA DE CO2

(Plenaria)

M.Sc. WILLAMS RODRIGO QUISPE URURE

willams.urure@edu.ufes.br

Semblanza:

Willams Rodrigo Quispe Urure es Licenciado en Física por la Universidad Mayor de San Andrés (UMSA), donde se especializó en la aplicación computacional de Wavelets bajo la tutela del Prof. Flavio Ghezzi. Obtuvo el grado de Master of Science (MSc) en Física, en el área de Materia Condensada, por la Universidad Federal de Juiz de Fora (UFJF), bajo la tutela del Prof. Fernando Sato. Actualmente, es investigador doctoral en la Universidad Federal de Espírito Santo (UFES), orientado por el Prof. Wendel S. Paz, con un proyecto financiado por la FAPES.

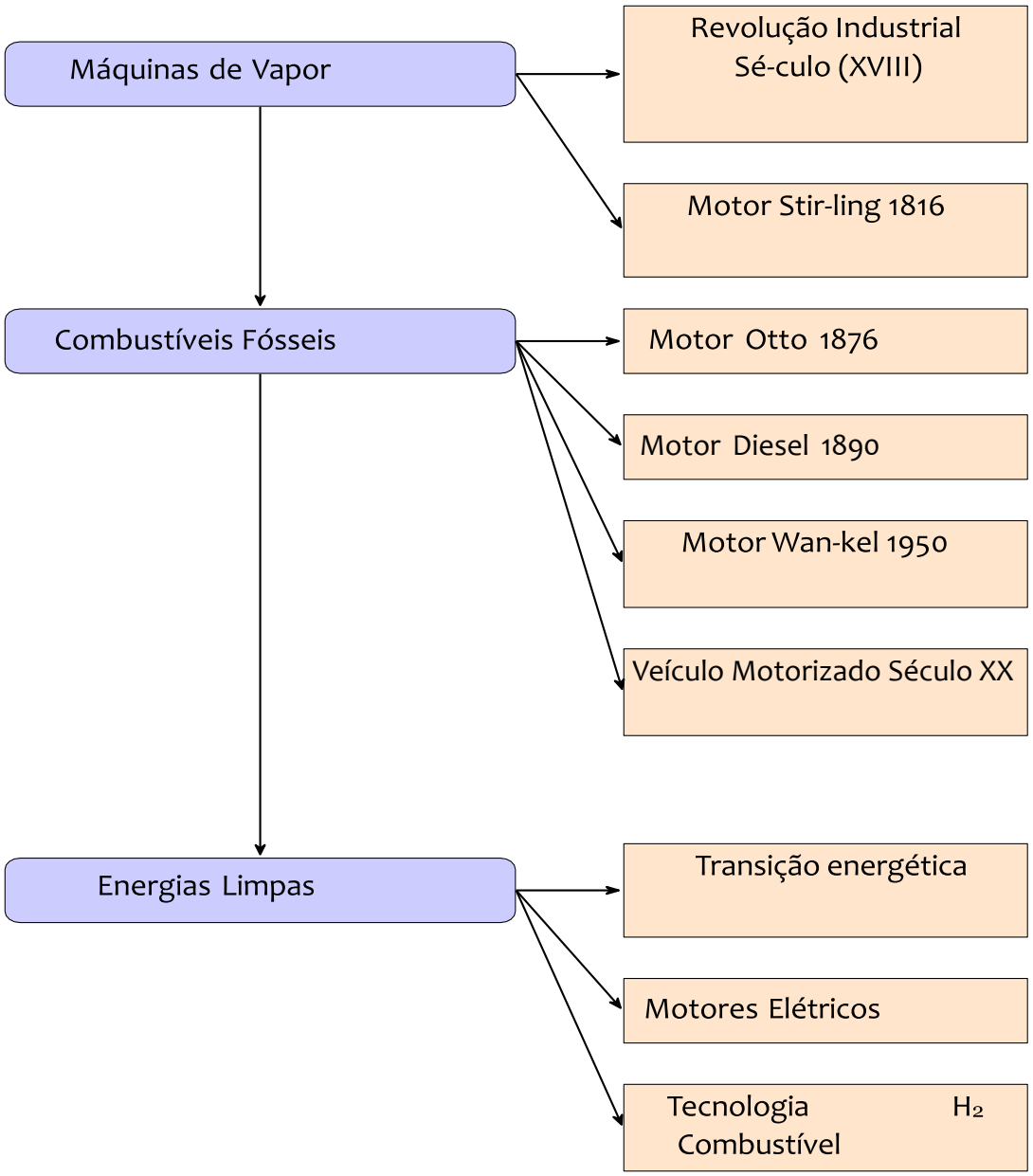
Su investigación actual se centra en la Física Computacional de la Materia Condensada, con énfasis en el estudio y diseño de materiales bidimensionales para la caracterización, captura de CO_2 y almacenamiento de H_2, mediante métodos de primeros principios (DFT) y Dinámica Molecular. Posee amplia experiencia en el desarrollo de scripts en Python y Bash para el análisis de datos, así como en el uso de herramientas especializadas de simulación como DFTB+, WIEN2k y Quantum ESPRESSO.

Introducción

Após a Revolução Industrial no século XVIII, desenvolveram-se as primeiras máquinas a vapor. Após a crescente demanda, surgiu a necessidade de novas fontes de combustível eficientes. Alguns combustíveis utilizados eram os fósseis, como carvão e madeira [1]. Com o objetivo de aumentar a produção, surgiram diferentes tipos de motores, um deles foi o motor de explosão de quatro tempos, tornando-se um dos motores de combustão interna mais populares patenteado por Nikolas Otto em 1876. O motor de Wankel foi criado em 1954, utiliza um rotor triangular no lugar dos pistões e tem poucos componentes em comparação com o motor tradicional, sendo menor e mais leve. O motor Stirling foi inventado por Robert Stirling em 1816, é um motor de combustão externo que funciona sobre um ciclo termodinâmico cerrado; pode funcionar com qualquer fonte de calor, incluindo a diferença de temperatura entre a mão humana e o ambiente. O motor de combustão interna a diesel foi desenvolvido por Rudolf Diesel na década de 1890, é conhecido por sua alta eficiência térmica, não tem velas de ignição; devido à alta compressão do ar, ocorre o processo de combustão. O motor elétrico foi construído por Michael Faraday em 1821 e pode converter a energia elétrica em energia mecânica e vice-versa. Os motores de reação, desenvolvidos durante a segunda guerra mundial, ejetam gases a grande velocidade para gerar empuxo e foram usados na aviação. O motor de foguete funciona emitindo propulsores em alta velocidade em uma direção oposta ao movimento desejado e são essenciais para a exploração espacial. Depois da popularização dos motores, uma nova era começou e, com o uso de veículos motorizados, a utilização combustíveis fósseis aumentou. Após o sucesso do uso de combustíveis fósseis, tornou-se evidente o aumento significativo no número de veículos motorizados na vida cotidiana e na indústria. Consequentemente, todo o consumo desses combustíveis fósseis trouxe novos problemas [2, 3, 4]. A taxa de consumo de combustíveis fósseis foi maior que a taxa

de produção pela natureza, levando a uma possível escassez de combustível. Além disso, o uso de combustíveis fósseis gera uma alta emissão de CO_2, tornando-se um problema ambiental [5].

Figura 1 – Estrutura histórica do uso dos combustíveis e a evolução das máquinas Fonte:



Elaboração própria

Nos últimos anos, o problema da poluição foi aumentando de forma perigosa, afetando negativamente a saúde da população. Isso se deve, entre outros fatores, aos danos causados ao meio ambiente já que a proteção da atmosfera, atualmente, não é suficiente para lidar com os efeitos da radiação ultravioleta. As emissões dos gases do efeito estufa vêm aumentando a cada década em vez de diminuir, devido ao incremento no uso de combustíveis fósseis que o setor da indústria requer para funcionar corretamente [3]. Com os avanços na civilização social, na ciência e na tecnologia, surgiu um novo padrão de desenvolvimento coordenado entre "petróleo", "gás natural", "energia convencional" e "energia não convencional". A energia fóssil tradicional não é renovável, enquanto os recursos energéticos não fósseis são renováveis e completarão a "revolução final" da energia convencional. Se for reconhecido que a indústria do petróleo tem um ciclo de desenvolvimento de mais ou menos 300 anos, já se passaram ao menos 150 anos desde o início da indústria mundial do petróleo em 1859, e agora os 150 anos restantes podem ser um novo ciclo para o uso de diferentes tipos de energia e novas oportunidades utilizando, energia eólica, solar, geotérmica, energia armazenada e a energia de hidrogênio. Talvez a "nova revolução energética" venha antes do esgotamento da energia fóssil. A energia era usada principalmente para atender às necessidades de sobrevivência na sociedade primitiva. A demanda por energia aumentou de forma crescente devido à melhoria da qualidade de vida humana e à produção industrial primária na sociedade atual [4, 3]. Devido ao desenvolvimento acelerado da civilização social desde a revolução industrial, a demanda humana por transporte no mundo inteiro aumentou significativamente junto com a demanda da indústria moderna por energia, atingindo um nível incontrolável. Nos últimos anos problemas ecológicos gerados pelos resíduos resultantes do desenvolvimento e utilização de energia de alto carbono afetaram o planeta [6, 7]. Por outro lado a demanda ecológica por produção e consumo de energia foi incluída no processo de desenvolvimento energético nos últimos anos. O progresso científico e tecnológico

visa impulsionar as revoluções energéticas. Como exemplo, podemos citar na história da indústria petrolífera a qual é uma história de desenvolvimento científico e tecnológico juntamente com o desenvolvimento espacial que foi sustentada por essa energia não renovável. Atualmente, existem novas fontes de energia, como a solar, hidrelétrica e a eólica, sendo essas fontes de energias renovável denominadas energia verde (do inglês "green energy"). Os novos desafios deste século concentram-se nos estudos de fontes de energia verde baseadas em fontes a base de hidrogênio [8, 9] devido à redução do impacto ambiental, produzindo o mínimo de resíduos secundários e promovendo a sustentabilidade como um princípio fundamental para o desenvolvimento futuro [10, 11].

Objetivos Objetivo geral

Investigar, por meio de simulações computacionais, o potencial de alótropos bidimensionais de grafeno decorados com metais alcalinos para o armazenamento de hidrogênio, visando sua aplicação no desenvolvimento de tecnologias de energias renováveis.

Objetivos Específicos

- Propor e avaliar, por meio de cálculos de primeiros princípios, a estabilidade estrutural e eletrônica de alótropos de carbono bidimensionais, a fim de selecionar candidatos promissores para a funcionalização.
- Investigar o efeito da funcionalização das estruturas selecionadas com metais alcalinos (e.g., Li, Na, K) em sua estabilidade geométrica e energética.
- Calcular a capacidade gravimétrica teórica de armazenamento de hidrogênio para os sistemas funcionalizados mais estáveis, avaliando seu potencial frente às metas estabelecidas por órgãos de referência (e.g., U.S. DOE).

- Determinar as energias de adsorção das moléculas de hidrogênio e analisar a termodinâmica do processo de dessorção, visando identificar a faixa de temperatura operacional adequada para os sistemas.
- Estudar o fenômeno de dessorção do hidrogênio utilizando a equação de Van't Hoff, a fim de compreender os aspectos termodinâmicos do processo.
- Validar a estabilidade térmica das configurações propostas através de simulações de dinâmica molecular em temperaturas operacionais.
- Estimar as temperaturas de dessorção do hidrogênio por meio de simulações de dinâmica molecular com aquecimento controlado, correlacionando os resultados com as análises termodinâmicas.

Estrutura da dissertação

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: O capítulo 1, apresenta a introdução, objetivos e a organização de texto. No capítulo 2, tem-se fundamentação teórica - que sustenta o trabalho - esclarecendo, descrevendo os conceitos mais importantes e explicando o diferencial da proposta com relação a trabalhos existentes vindos da revisão bibliográfica. No capítulo 3, ressaltamos o desempenho da metodologia para a realização desta pesquisa. No capítulo 4, apresentamos e explicamos os resultados gerados. No capítulo 5 explicamos uma resenha das conclusões e as considerações finais da dissertação.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Hidrogênio

O hidrogênio é, de longe, o elemento químico mais abundante, compondo cerca de 75% da massa de toda a matéria visível na Terra, sendoé encontrado majoritariamente na água (H_2O). O hidrogênio na forma diatômica H_2, no estado natural e sob condições normais é incolor, inodoro, insípido e não tóxico. [12, 13]. O

H_2 pode ser encontrado em várias formas. Uma de suas características é a inflamabilidad - sua queima no ar gera uma ampla faixa de concentrações - e em CNTP (Condições Normais de Temperatura e Pressão), não comprimido, ocupa 11.250 L kg^{-1}. Ao ser liquefeito (tornar-se líquido) a uma temperatura – 253,8 °C (20 K), ocupa um volume de 14.1 L kg^{-1} e possui conteúdo energético equivalente a ~ 120 MJ kg^{-1} (33.3 kWh kg^{-1}), o que é maior se comparado a ~ 44.4 MJ kg^{-1} (12.4 kWh kg^{-1}) gerado pela gasolina sob um mesmo volume. [14, 15].

Armazenamento de hidrogênio

As propriedades químicas do hidrogênio podem variar dependendo das condições nas quais este se encontra. Devido ao comportamento ambivalente, é possível que se formem ligações covalentes e ligações iônicas, com uma ampla possibilidade de reações químicas [14, 16].
O hidrogênio pode ser armazenado em três diferentes formas:

1. *Armazenamento por fenômeno físico*: Esta forma de armazenamento é baseada na acumulação de energia potencial e cinética e envolve conversão da energia, sem alterar a composição química. É possível armazenar hidrogênio alterando a pressão e a temperatura de forma controlada [17, 18].

   Por exemplo:

   - É possível armazenar o hidrogênio comprimindo o gás H_2 até um valor de pressão de 30 MPa (megapascal). O hidrogênio armazenado é usado principalmente na indústria como fonte de energia para pequenos motores, porém possui baixa densidade e grande volume, dificultando o transporte e a logística [15, 18].
   - Uma das vantagens de utilizar o estado líquido é a alta densidade.

O gás H_2 pode ser liquefeito (tornar-se líquido) a uma temperatura de 20 K (Kelvin) e com uma pressão de 1 atm (atmosfera). Porém, a dificuldade em diminuir a temperatura necessária para a liquefação eleva o custo de produção. Além disso, há dificuldade em manter uma temperatura baixa, o que requer tanques específicos com isolamento térmico duplo [19].

- O H_2, com um procedimento de crio-compressão, pode atingir até uma pressão de 35 MPa (megapascal) e uma temperatura de 20 K (Kelvin), criando uma densidade alta, ideal para seu uso. Porém, a combinação das condições de liquefação e compressão aumenta as dificuldades de manter as condições normais de temperatura e pressão, tornando inviável seu uso, devido à dificuldade em ter um método para armazenar o hidrogênio de forma eficiente e com um custo baixo [19, 16].
- Outra forma consiste em misturar o estado sólido ao líquido, até o ponto triplo da fase. Atualmente, esse tipo de procedimento apenas é feito em laboratório devido à sua natureza sensível. Pequenas variações podem gerar muito perigo; não é recomendável que as condições de temperatura e pressão mudem abruptamente sem controle [20, 21].

A maior dificuldade do procedimento consiste em manter uma temperatura baixa e ao mesmo tempo uma pressão alta. Outro problema a se considerar é a logística do transporte, aumentando o risco de o hidrogênio se inflamar e explodir. Essas limitações impossibilitam o uso prático, no intuito de substituir os combustíveis fósseis, pois é necessário obter um combustível estável e de armazenamento seguro para o uso diário [15, 22, 23].

2. *Armazenamento por fenômeno químico*: As reações químicas, produzem conversões de energia nas ligações químicas. A energia armazenada

através de ligações químicas é liberada através de reações químicas inversas [17, 19]. Por exemplo:

- Hidretos. Na natureza existem uma variedade de combinações de moléculas ligadas quimicamente com hidrógenos, essas ligações são denominadas hidretos, e são classificados com base na natureza das ligações químicas [24, 25]. Os principais hidretos utilizados no armazenamento são:

  - *Hidretos iônicos*: Levam a denominação de hidretos iônicos aqueles que são formados por metais alcalinos (elementos do grupo 1 e 2 da tabela periódica). Por exemplo: LiH, CaH_2, NaH, são sólidos iônicos, com pontos de fusão elevado que reagem com água, liberando os hidrogênios no estado gasoso [24].
    - *Hidretos covalentes*: São aqueles hidretos formados por elementos não-metálicos ou semi-metálicos. por exemplo: metanol (CH_3OH), amônia (NH_3), água (H_2O), são hidretos que estão principalmente no estado líquido ou gasoso e podem ter baixos pontos de fusão [25].
    - *Hidretos metálicos intersticiais*: São chamados assim porque são formados pela inserção de átomos de hidrogênio nos interstícios da rede da metálica. O hidreto metálico é um dos métodos químicos mais eficiente na atualidade, devido ao peso leve que facilita o transporte.

- Orgânico líquido. O hidrogênio gasoso ao ligar-se quimicamente com um com-posto orgânico resulta num composto líquido estável,

aproveitando o fenômenos químicos. Para desidrogenar o material é aquecido até certo ponto e processado com um catalisador, dessa forma o hidrogênio é liberado em forma gasosa [25]. Quando o hidrogênio está no estado: ($C_6H_6/C_{12}H_{12}$). É mais seguro transporta-lo, devido ao seu estado líquido. A desvantagem é que o processo de aquecimento precisa de muita energia, então, ele acaba perdendo energia efetiva, além de requer um catalisador de custo elevado [24, 26, 25].

- Hidrólises. O fenômeno de hidrólises utiliza moléculas de água para divi-dir a própria molécula misturando o íon hidrogênio (H^+) e íon hidroxila (OH^-)provenientes da água [24, 27]. por exemplo: ($NaBH_4$).
- Adsorção química. Também conhecida como quimissorção, é baseado na utili-zação de uma estrutura sólida e porosa com o intuito de aderir moléculas de hidrogênio e formar ligações químicas (MOFs, CNTs) [24, 26, 25]. A maior dificuldade no processo de adsorção química é o mesmo torna-se irreversível sob condições específicas [28].

3. *Fisisorção*. A fisisorção é um fenômeno físico que envolve uma estrutura sólida e porosa na qual se aderem forças intermoleculares fracas. A diferença com a quimissorção é que as ligações com hidrogênio molecular são realizadas com forças de van der Waals, resultantes da interação entre moléculas, átomos ou íons, que são mais fracas que as ligações químicas, permitindo o processo de armazenamento de Hidrogênio [29, 26].

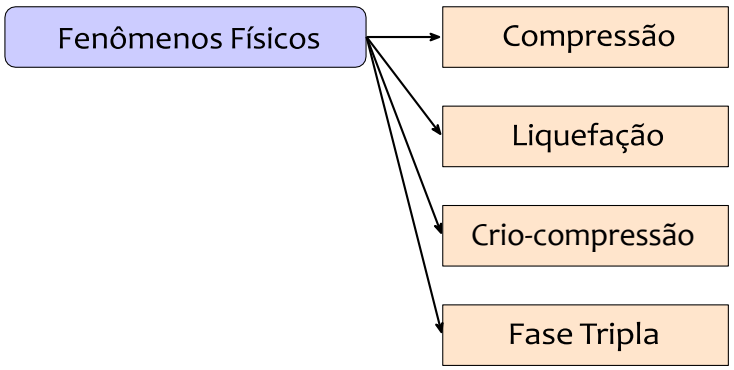
Estrutura molecular

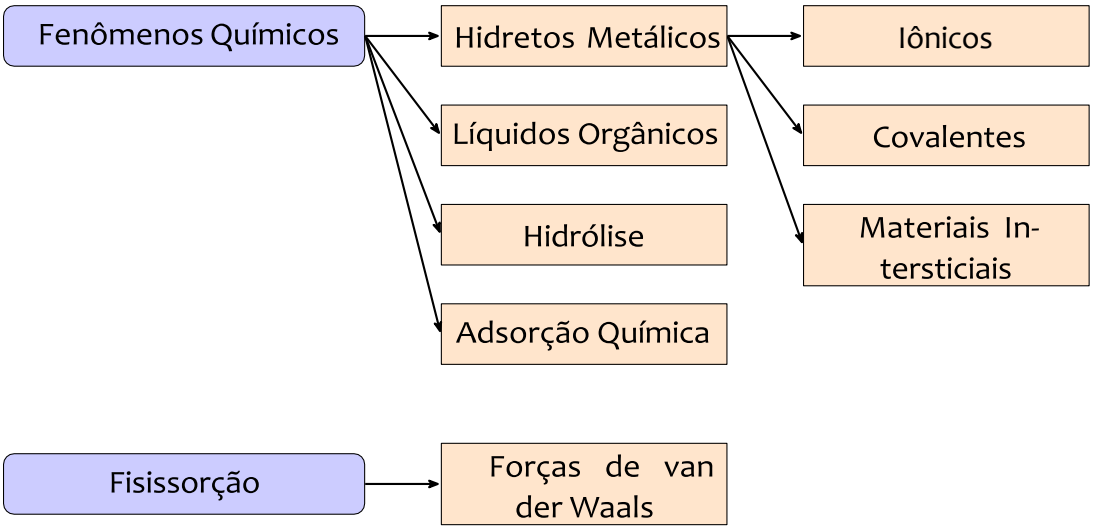
A estrutura molecular refere-se à disposição tridimensional dos átomos dentro de uma molécula considerando-se também os diferentes tipos de ligações químicas e as forças intermoleculares que afetam as propriedades [30].

Tipos de estruturas moleculares

Os tipos de estruturas moleculares dependem da disposição geométrica dos átomos em uma molécula e das forças que atuam entre eles. Entre as mais comuns, temos a linear, onde os átomos estão alinhados da mesma forma que o (CO_2). A estrutura angular ocorre quando há pares de elétrons não ligantes que provocam um desvio na

Figura 2: Formas de armazenamento do hidrogênio.





Fonte: Elaboração própria

geometria como na água (H_2O). A estrutura trigonal plana é aquela onde três átomos estão distribuídos em torno de um átomo central formando um triângulo (como no BF_3); A estrutura tetraédrica é comum em moléculas com quatro átomos ligados ao central (como o CH_4); As estruturas geométricas mais complexas são aqueles encontradas em macromoléculas, como proteínas e polímeros, onde as interações entre cadeias e grupos funcionais determinam propriedades específicas. Essas estruturas influenciam diretamente a polaridade, reatividade e as interações intermoleculares, impactando desde a solubilidade até o ponto de fusão e ebulição das substâncias [31].

Ligações químicas e geometria molecular

As ligações químicas e a geometria molecular estão diretamente relacionadas ao tipo de ligação entre os átomos e influencia diretamente na forma tridimensional das moléculas. As principais ligações químicas são covalentes, onde os átomos compartilham elétrons como a água, (H_2O). As ligações iônicas, envolvem a

transferência de elétrons entre átomos como no (*NaCl*). As ligações metálicas são responsáveis pela condutividade e maleabilidade dos metais. A geometria molecular é determinada pela Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons da Camada de Valência ou VSEPR (sigla do inglês Valence Shell Electron Pair Repulsion) . A VSEPR prevê a disposição correta dos átomos minimizando a repulsão entre pares eletrônicos. Assim as moléculas podem ter geometrias lineares, angulares, trigonais planares, tetraédricas, entre outras. A combinação entre os tipos de ligação e geometria definem propriedades importantes, como polaridade, solubilidade e relatividade química [32].

Energia de formação

A energia de formação na termodinâmica fundamental é utilizada para avaliar a estabilidade de compostos ou sistemas formados por múltiplos elementos. Também representa a variação de energia associada à formação de um sistema a partir de seus constituintes individuais, considerados em seus estados de referência mais estáveis. A equação geral para o cálculo da energia de formação é dada por:

$$E_{\text{form}} = E^{\text{sistema}}_{\text{total}} - \sum_{i} n_i E^{\text{ref}}_{i}, \qquad (2.1)$$

Nesta equação, E_{form} corresponde à energia de formação do sistema, E^{sistema} é a energia total do sistema composto (calculada, por exemplo, via DFT ou DFTB+), E^{ref} representa a energia de referência de cada elemento químico *i* no seu estado padrão (como o metal no estado sólido ou moléculas como H_2), e n_i é o número de átomos do elemento *i* presentes no sistema. A equação expressa, portanto, a diferença entre a energia total do sistema e a soma das energias dos átomos isolados. Um valor

negativo de ΔE_{form} indica que o sistema é energeticamente mais estável do que seus constituintes separados, sugerindo que sua formação é espontânea. Já valores positivos indicam instabilidade termodinâmica ou formação não espontânea do sistema.

Estrutura cristalina

A estrutura cristalina refere-se à organização periódica e ordenada dos átomos, íons ou moléculas em um sólido, formando uma rede tridimensional repetitiva chamada rede cristalina. Essa estrutura é caracterizada por uma célula unitária, que define a menor unidade repetitiva do cristal e pelos parâmetros de rede, que determinam distâncias e ângulos entre os átomos [33]. Diferentes arranjos atômicos resultam em distintas propriedades mecânicas, elétricas e térmicas, sendo estas propriedades fundamentais para a modelagem e simulação de materiais em diversas áreas, como física, química e ciência dos materiais.

Arranjo atômico e propriedades macroscópicas

O arranjo atômico em um material refere-se à maneira como os átomos ou moléculas estão organizados em uma estrutura, e influencia diretamente as suas propriedades macroscópicas. Em materiais cristalinos, os átomos estão dispostos de forma ordenada e repetitiva, sendo que a disposição das redes pode ser cúbica, hexagonal, ou outras formas geométricas, o que confere ao material características como dureza, resistência e condutividade. Já os materiais amorfos ou desordenados - como por exemplo os vidros
- têm um arranjo atômico irregular o que resulta em diferentes propriedades referentes à sua transparência e fragilidade. A regularidade ou a falta de organização no arranjo atômico também afeta propriedades como condutividade elétrica, condutividade térmica e expansão térmica, tornando a compreensão do arranjo atômico fundamental para projetar materiais com características específicas

e aplicações, na construção civil e nos campos da eletrônica e da nanotecnologia [34].

Arranjo regular

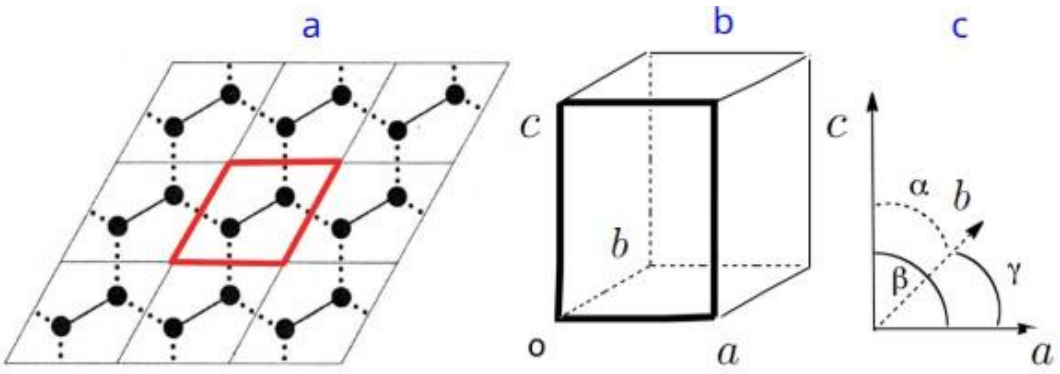
A cristalinidade faz com que os átomos ou moléculas estejam organizados de forma ordenada e em um padrão repetitivo, conhecidos como redes cristalinas. Isso significa que cada átomo tem uma posição bem definida em relação aos outros, formando padrões que se repetem no espaço tridimensional [8].

Redes cristalinas

Os tipos de estruturas de redes cristalinas referem-se à disposição ordenada dos átomos, íons ou moléculas dentro de um cristal. Cada material cristalino possui uma rede única caracterizada por uma célula unitária, que é a unidade repetitiva da estrutura. As principais redes cristalinas podem ser cúbica, hexagonal, tetragonal e ortorrômbica. As redes cúbicas são aquelas em que os átomos estão organizados em um arranjo isotrópico, como no ouro (*Au*) [31].

As redes hexagonais são aquelas em que os átomos formam uma célula unitária com uma base em forma de hexágono, como no grafeno (figura 3). As redes tetragonais utilizam dois eixos iguais e um eixo diferente; elas podem ser encontradas em materiais como o dióxido de titânio (TiO_2). As redes ortorrômbicas possuem ângulos retos, como o sal de cozinha (*NaCl*). Essas diferentes disposições afetam diretamente as propriedades macroscópicas dos materiais, como densidade, condutividade elétrica, resistência mecânica e dureza, e são fundamentais para a aplicação dos materiais em diversos ramos indústriais [30].

Figura 3: a) Estrutura cristalina de grafeno com uma célula unitária de dois átomos de carbono. b) Lados da célula. c) Ângulos entre os eixos.



Fonte: Imagem adaptada de [33].

Célula unitária

A célula unitária é a unidade básica da rede cristalina e representa a menor repetição estrutural que, ao ser repetida, forma o cristal inteiro. Cada célula unitária contém um número específico de átomos, e as características da célula unitária determinam as propriedades do material [35].

Parâmetros de rede

Os parâmetros de rede são as distâncias e ângulos que definem o tamanho e a forma da célula unitária. Os principais parâmetros são:

- **Lados da célula** (a, b, c): as distâncias entre os pontos de repetição ao longo dos três eixos do cristal.
- **Ângulos entre os eixos** (α, β, γ): os ângulos entre os eixos da célula unitária.

Esses parâmetros são fundamentais para descrever a simetria e a periodicidade da rede cristalina [36].

Espaço recíproco

O *espaço recíproco* é uma construção matemática usada na física do estado sólido, que descreve as propriedades periódicas de uma rede cristalina. Em vez de representar a rede no espaço físico, o espaço recíproco fornece uma descrição das ondas de matéria, incluindo os elétrons, em termos de vetores de onda. Os vetores no espaço recíproco são usados para representar a periodicidade das ondas que se propagam pelo cristal, permitindo estudar as interações entre as partículas e a rede cristalina. A análise do espaço recíproco é fundamental para entender a estrutura de bandas eletrônicas e as propriedades dinâmicas dos sólidos, como condutividade e absorção óptica [36].

Pontos k

No contexto da física do estado sólido e da teoria de bandas eletrônicas, um ponto **k** refere-se a um vetor de onda que descreve a propagação de ondas de partículas, como acontece com os elétrons em um cristal. Este vetor pertence ao *espaço recíproco*, que é um espaço matemático usado para descrever as propriedades periódicas de uma rede cristalina [37].

Zona de Brillouin e pontos de alta simetria

A *Zona de Brillouin* é uma região no espaço recíproco que define os limites fundamentais para a análise das propriedades eletrônicas de sólidos cristalinos. Ela é determinada pela geometria da rede cristalina e inclui todos os pontos **k** que podem ser descritos por ondas planas dentro dessa região. A Zona de Brillouin é crucial para o estudo das bandas eletrônicas, pois os elétrons se comportam de maneira diferente dependendo da posição dentro dessa zona. Os pontos de alta simetria, como Γ, *X*, *M* e *K*, são usados para construir as curvas de dispersão da energia dos elétrons e para entender as propriedades eletrônicas do material [38].

Defeitos cristalinos e o impacto nas propriedades dos materiais

Embora as redes cristalinas sejam ordenadas, elas frequentemente contêm defeitos, que podem ser classificados como:

- **Vacâncias:** São lacunas onde deveriam estar os átomos.
- **Intersticiais:** São átomos que ocupam posições entre os átomos regulares da rede onde não deveriam estar.
- **Deslocações:** Existem deslocamentos nas camadas de átomos que afetam a defor-mação do material.

Esses defeitos influenciam as propriedades do material, como a dureza, a condutividade e a resistência mecânica [35].

Mecanismos de armazenamento por fisissorção

O armazenamento por fisissorção ocorre quando moléculas de gás são adsorvidas da superfície de um material por meio de interações fracas, tais como as forças de van der Waals. Esse mecanismo é amplamente investigado em materiais porosos para aplicações em armazenamento de hidrogênio e outros gases [39].

Interações físicas e reversibilidade

A fisissorção é caracterizada por sua natureza física, sem a formação de ligações químicas, o que torna o processo reversível. A energia de adsorção associada à fisissorção varia tipicamente entre 4 e 10 kJ/mol, permitindo a adsorção e dessorção do gás sob condições controladas [39].

Raios de van der Waals

Os *raios de van der Waals* são essenciais na modelagem de interações intermoleculares fracas, como as forças de dispersão que reagem na adsorção física de hidrogênio em superfícies. Durante o armazenamento de hidrogênio, especialmente em materiais porosos ou funcionalizados, a distância de aproximação entre o gás e o material hospedeiro influencia diretamente na eficiência do processo. Valores precisos desses raios permitem simulações mais realistas da interação H_2–superfície, contribuindo para o entendimento da capacidade, estabilidade e reversibilidade do armazenamento. Assim, a consideração adequada dos raios de van der Waals é crucial na análise e no armazenamento eficiente de hidrogênio [40].

Tabela 1: Raios de van der Waals dos elementos considerados nesta dissertação.

Elemento	Raio de van der Waals (Å)
H	1,09
C	1,70
Li	2,63
Na	2,77
K	3,02

Fonte: Tabela adaptada de [40].

Materiais com alta área superficial

Os materiais porosos, como o carvão ativado, *Metal-Organic Frameworks* (MOFs), *Covalent Organic Frameworks* (COFs) e nanotubos de carbono, são altamente eficientes para o armazenamento por fisissorção devido à grande área superficial e à elevada capacidade de adsorção [41].

Influência da temperatura e pressão

A fisissorção é favorecida por baixas temperaturas e altas pressões. Para o armazenamento de hidrogênio, por exemplo, esse mecanismo é mais eficiente em temperaturas criogênicas, por volta de 77 K (Kelvin) [39].

Efeito de confinamento

Em materiais altamente porosos, como o γ-grafino decorado, a estrutura pode induzir um efeito de confinamento, aumentando a densidade do gás adsorvido e melhorando a capacidade de armazenamento [42].

Dessorção controlada

A dessorção refere-se à remoção do H_2 no estado gasoso, podendo ocorrer quando a pressão é reduzida ou a temperatura é aumentada. Esse mecanismo é relevante para aplicações em tanques de armazenamento de hidrogênio em veículos [43].

Teoria da equação de Van't Hoff

A dessorção do hidrogênio H_2 é um fator crucial para que ele permaneça na forma ideal para utilização como combustível. Sem a dessorção controlada, existe uma influência negativa que afeta diretamente a eficiência e a viabilidade do processo. Para avaliar a temperatura na qual ocorre a dessorção do H_2, utilizamos uma abordagem baseada na equação de Van't Hoff, a qual permite estimar indiretamente a temperatura de dessorção [44, 45].

$$T_D = \frac{E_{ads}}{K_B} \left(\frac{\Delta S}{R} - \ln \frac{P}{P_0} \right)^{-1}, \qquad (2.2)$$

Nesta equação, E_{ads} representa a energia média de ligação da molécula de hidrogênio (H_2) ao material de armazenamento; K_B é a constante de Boltzmann (8.61733 × 10^{-5} eV/K); P é a pressão do sistema, assumida como 1 atm; P_0 é a pressão de referência (1 atm); R é a constante universal dos gases (8.314 J/K·mol); e ΔS corresponde à variação de entropia durante a transição do H_2 da fase gasosa para a fase líquida.

Para os cálculos, utilizamos o valor da entropia ΔS = 130.7 J/K·mol, conforme encontrado na literatura [43]. Dessa forma, a equação de Van't Hoff permite estimar a temperatura de dessorção do hidrogênio, fornecendo informações fundamentais para o desenvolvimento de materiais eficientes para o armazenamento e a liberação de H_2 em condições apropriadas [46].

Definição das energias de ligação e adsorção

Para definir a estabilidade dos átomos ao serem inseridos dentro de uma monocamada, define-se a energia de ligação (E_b), que mede a força com que os átomos metálicos se ligam dentro da nanoestrutura [43]. Essa energia é calculada pela equação:

$$E_b = \frac{E_T - E_{NE} - mE_M}{m}, \qquad (2.3)$$

onde E_T é a energia total do sistema composto pela nanoestrutura e pelos átomos metálicos adsorvidos; E_{NE} representa a energia da nanoestrutura isolada; m corresponde ao número de átomos metálicos envolvidos na adsorção; e E_M é a energia de um único átomo metálico no estado isolado.

Energia média de adsorção

A energia média de adsorção (E_{ads}) das moléculas de hidrogênio sobre a nanoestrutura original e decorada com metal é calculada pela equação

$$E_{ads} = \frac{E_T - E_{NEC} - nE_{H_2}}{n}, \qquad (2.4)$$

onde E_T representa a energia total do sistema após adsorver n moléculas de hidrogênio (H_2); E_{NEC} é a energia da estrutura antes de adsorver as moléculas de hidrogênio; e n é o número de moléculas adsorvidas. Um valor negativo de E_{ads} indica que a adsorção do hidrogênio é energeticamente favorável [47, 48].

Energia de adsorção sequencial

A energia de adsorção sequencial (E_c) quantifica a variação energética associada à adsorção progressiva de moléculas de H_2 dentro da estrutura. Esse parâmetro permite avaliar o custo energético envolvido na inserção de cada nova molécula de H_2, considerando não apenas a interação direta com o material hospedeiro, mas também os efeitos das moléculas previamente adsorvidas.
Segundo a equação:

$$E_c = E_{T+nH_2} - E_{T+(n-1)H_2} - E_{H_2}, \qquad (2.5)$$

Dessa forma, E_{T+nH_2} e $E_{T+(n-1)H_2}$ representam a soma da energia total do sistema com n e $n-1$ moléculas de H_2, respectivamente. Assim, E_c fornece informações essenciais sobre a estabilidade e a eficiência da adsorção em diferentes condições, sendo um indicador crucial para o entendimento do comportamento termodinâmico do sistema. Estudos anteriores demonstram a relevância dessa propriedade para otimizar materiais destinados ao armazenamento de hidrogênio [43, 47, 48].

Peso gravimétrico

O peso gravimétrico na adsorção é um parâmetro fundamental para avaliar a eficiência de um material no armazenamento de hidrogênio molecular (H_2), pois expressa a fração da massa total do sistema correspondente ao hidrogênio adsorvido. Matematicamente, pode ser definido como:

$$\%wt = \frac{nW_{H_2}}{nW_{H_2} + W_{\text{estrutura}}} 100\%, \quad (2.6)$$

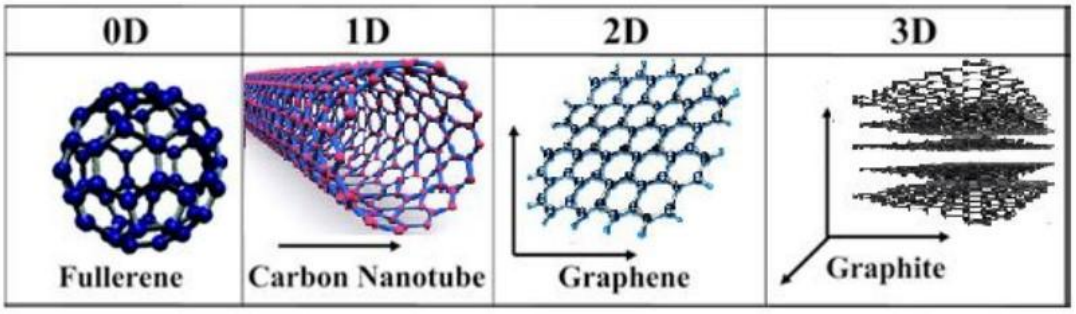
Onde $\%wt$ representa o peso gravimétrico, nW_{H_2} é a massa total das moléculas de hidro-gênio adsorvidas na superfície da estrutura, e $W_{\text{Estrutura}}$ é a massa do nanomaterial sólido que serve para a adsorção. Este parâmetro é crucial para determinar a capacidade de armazenamento de hidrogênio em materiais porosos. Superfícies funcionais e compósitos são desenvolvidos para aplicações energéticas. Quanto maior o peso gravimétrico, maior a eficiência do material em armazenar hidrogênio com uma menor massa estrutural, o que é um fator essencial para aplicações em mobilidade, células a combustível e tecnologias emergentes de energia limpa. Além disso, a otimização do peso gravimétrico está direta-mente relacionada com as propriedades físico-químicas do material, como a porosidade, a área superficial, a interação química com o hidrogênio e a estabilidade térmica. Estudos recentes demonstram que estruturas baseadas em materiais nanoestruturados, como gra-feno funcionalizado e materiais metal-orgânicos (MOFs), apresentam elevados valores de $\%wt$, tornando-se alternativas promissoras para o armazenamento eficiente de hidrogênio em condições ambientais controladas [47, 49, 48].

Nanoestruturas

As estruturas de nanomateriais podem ser classificadas com base na quantidade de dimensões confinadas na escala nanométrica (1–100 nm) e são categorizadas em 0D, 1D, 2D e 3D, como mostrado na Figura 4. Os materiais 0D (zero-dimensionais) possuem confinamento eletrônico em todas as três dimensões espaciais, como pontos quânticos e nanopartículas, e apresentam propriedades ópticas e eletrônicas únicas devido ao efeito de confinamento quântico. Nos 1D (unidimensionais), o confinamento ocorre em duas dimensões, permitindo a propagação de elétrons apenas ao longo de uma única direção. Como exemplo, estão os nanotubos de carbono, nanofios metálicos e nanofibras, amplamente utilizados em eletrônica e sensores [26, 50].

Já nos 2D (bidimensionais), o confinamento ocorre em apenas uma dimensão, permitindo que os elétrons se movam livremente nas outras duas direções. Esses materiais apresentam propriedades eletrônicas, térmicas e mecânicas excepcionais, como ocorre no grafeno, nos dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) e no fosforeno. Por fim, os 3D (tridimensionais) não possuem confinamento quântico significativo, pois suas

Figura 4 – Exemplos de nanoestruturas baseadas em carbono.



Fonte: imagem adaptada de [51].

dimensões estão acima da escala nanométrica em todas as direções. Porém, os materiais nanoestruturados 3D, como redes hierárquicas e materiais mesoporosos, são projetados para aplicações avançadas, como armazenamento de energia e catálise. Essas diferentes categorias de nanomateriais desempenham papéis fundamentais no desenvolvimento de novas tecnologias, incluindo nanoeletrônica, fotônica, biomedicina e armazenamento de energia [50, 45].

Estrutura 2D

Os materiais 2D possuem duas dimensões efetivas e podem atingir escalas macroscópicas, com espessura de poucos átomos. Normalmente, são compostos por apenas uma camada. O melhor exemplo de material 2D é a camada de grafeno, além de outras estruturas que contêm anéis benzênicos, como o grafino [50, 45].
Devido à elevada área superficial e à capacidade de interagir com moléculas adsorvidas, nanoestruturas 2D são amplamente estudadas para aplicações em armazenamento de hidrogênio, catalisadores, dispositivos eletrônicos e sensores de gás. No contexto do armazenamento de hidrogênio, essas estruturas oferecem superfícies altamente acessíveis para adsorção, promovendo uma maior densidade gravimétrica de armazenamento em comparação com materiais convencionais tridimensionais.

Grafeno

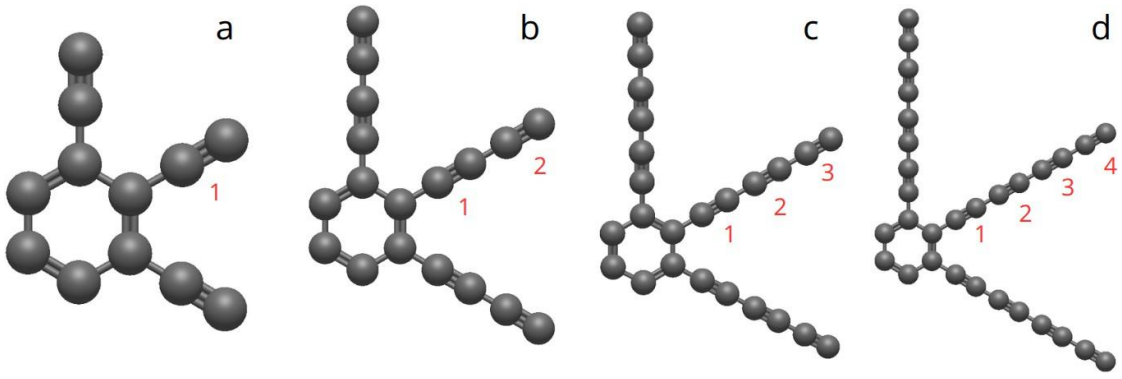
Nas últimas décadas, descobertas baseadas em carbono e grafeno representaram uma revolução no mundo científico. A estrutura do grafeno foi teoricamente proposta nos anos 1980 e testada com sucesso em 2010 [42].
O grafeno é um material bidimensional formado por uma única camada de átomos de carbono organizados em uma estrutura hexagonal, sendo composto apenas por ligações simples entre átomos de carbono dispostos em anéis hexagonais,

semelhante a um favo de mel. Apresenta propriedades de alta condutividade elétrica e térmica, alta resistência mecânica e flexibilidade por ser extremamente fino. Essas características favorecem a construção de tecnologias em escala nanométrica [35, 50, 48].

Grafinos

O carbono, devido à sua capacidade de apresentar estados de hibridização *sp* linear, sp^2 trigonal e sp^3 tetraédrico, pode, em princípio, originar novos alótropos além dos conhecidos diamante, grafite, buckminsterfulereno e grafeno. Nesse contexto, destacam-se uma série de alótropos formados por combinações específicas de átomos de carbono hibridizados sp^2 e *sp*, resultando em novas estruturas 2D com diferentes propriedades físicas e químicas. Dependendo do número de etinos (*n*) entre dois átomos de carbono hibridizados sp^2, ambos podem ser classificados como: grafeno (*n* = 0) Figura 3, grafino(*n* = 1) Figura 5a e grafidino(*n* = 2) Figura 5b.

Figura 5 – Célula unitária de *γ*-grafinos com diferentes números de triplas. a) Grafino com uma tripla. b) com duas triplas (Grafidino), c) com três triplas (Grafitrino), d) Quatro triplas (Grafiquatridino).

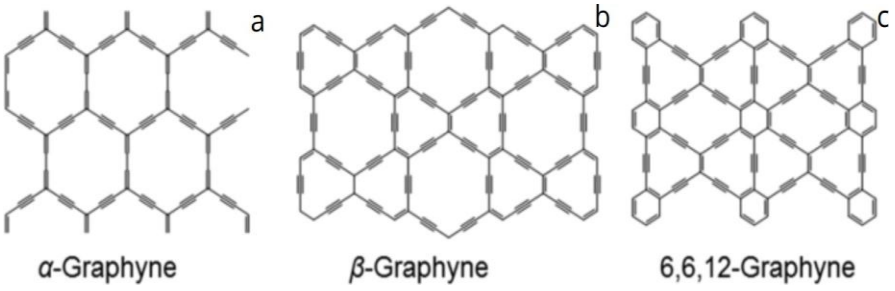


Fonte: Elaboração própria.

As dificuldades na síntese de estruturas com mais de três unidades de etinos ($n \geq 3$) Figuras 5c, 5d estão principalmente relacionadas à complexidade do processo de construção da molécula dentro dos grupos de grafinos [42, 52, 53, 54].

O grafidino é uma estrutura bidimensional semelhante ao grafeno, compartilhando muitas de suas propriedades. A diferença fundamental entre grafeno e grafino consiste na presença de ligações triplas (acetilênicas) alternadas com ligações simples entre os anéis hexagonais, criando redes de carbono mais complexas, com diferentes propriedades eletrônicas, estruturais e químicas. Na formação de estruturas 2D, a presença de "fu-ros"torna a rede naturalmente porosa. As diversas variações de conectividade entre os átomos de carbono apresentam diferentes tipos de grafinos, como a *α*-grafidino, *β*-grafidino e *γ*-grafidino, com propriedades eletrônicas e estruturais distintas, como mostra a Figura 6. Essa estrutura também gera vacâncias onde é possível inserir diferentes átomos, formando um material altamente poroso e com maior capacidade de armazenamento de moléculas de hidrogênio [45, 56, 55].

Figura 6 – Estrutura de a) *α*-Grafino. b) *β*-grafino. c) 6,6,12 grafino, em que o número indica o padrão de anéis de carbono presentes na estrutura.



Fonte: Imagem adaptada de [55].

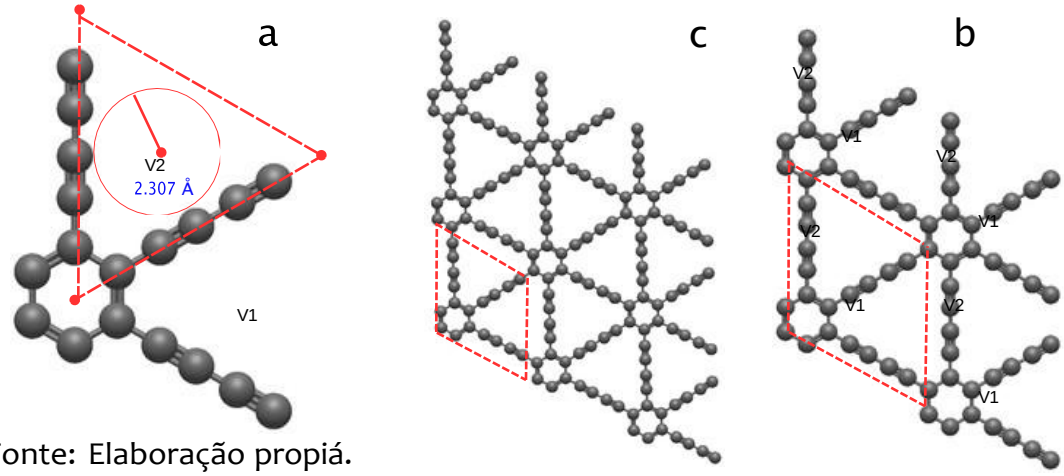
γ-grafidino 2D

O γ-grafidino é uma das formas estruturais da família dos grafidinos (*graphdiynes*, em inglês), que, por sua vez, pertencem à classe dos alótropos 2D do carbono, formados por átomos com hibridização *sp* e sp^2. Mais especificamente, o grafidino é caracterizado pela presença de duas unidades etinílicas (≡ C – C ≡) entre cada par de centros sp^2 conectados na rede, o que o diferencia do grafino. A letra γ (gama) refere-se à topologia específica da rede de carbono, ou seja, à maneira como os átomos estão organizados no plano. No caso do γ-grafidino, temos uma rede com simetria hexagonal modificada, em que os anéis de carbono sp^2 estão conectados por cadeias lineares de carbonos *sp*, formando uma estrutura porosa, altamente ordenada e bidimensional. As vacâncias estruturais, que fazem parte da porosidade da rede periódica e estável, permitem acomodar moléculas. Por isso, o γ-grafidino é promissor para aplicações como armazenamento de hidrogênio, adsorção seletiva de gases e funcionalização química [42, 52, 53, 54].

Expansão para Supercélulas

Para simular o comportamento periódico da estrutura e reduzir os efeitos de contorno, foi realizada a replicação da célula unitária ao longo dos vetores da rede, gerando supercélulas de dimensões adequadas ao estudo de adsorção e estabilidade estrutural como mostra na Figura 7.

Figura 7 – Estrutura de γ-grafidino com as vacâncias V1 e V2, a) Célula unitária. b) Supercélula 2x2. c) Supercélula 3x3.



Fonte: Elaboração propiá.

Decoração de nanomateriais

A decoração de materiais é um processo que envolve a inserção de impurezas ou átomos em uma estrutura sólida. As porosidades de um material favorecem a possibilidade de incorporar átomos em seu interior, procurando manter as características do nanomaterial 2D, melhorando a condutividade elétrica e a polarizabilidade, com o objetivo de aumentar a capacidade de armazenamento de hidrogênio pelo fenômeno de fisissorção [57, 45, 48].

Decoração de γ-grafidino com metais alcalinos

A energia necessária para que as moléculas de H_2 permaneçam adsorvidas sobre a superfície do γ-grafidino é insuficiente. Para superar essa limitação, consideram-se nanoestruturas de carbono e a dopagem com átomos metálicos como estratégias para aumentar a interação com o hidrogênio [58]. Segundo o trabalho de [59], foram investigados os tipos de absorbância que gera o potássio nos γ-grafinos usando DFT. Para testar as propriedades das estruturas se adicionam uma molécula de H_2 em

diferentes direções, o intuito foi avaliar a capacidade de absorção do hidrogênio, então nove moléculas de H_2 foram adicionados em sequência para ter uma melhor estrutura. Nos resultados propostos no artigo [59] obteve-se, os átomos do potássio K, permanecem na superfície do γ-grafino, com uma energia de absorção de 5.86 eV, com a presença de metais alcalinos (K, Na, Li) nas folhas de γ-grafidino pode-se modificar as interações da fisissorção, aumentando a capacidade de armazenamento e influenciando a temperatura de dessorção do hidrogênio [48].

Teoria funcional da densidade DFT.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) surgiu como uma resposta à complexidade computacional associada à resolução da equação de Schrödinger para sistemas com muitos elétrons. Na década de 1960, os físicos Pierre Hohenberg e Walter Kohn propuseram uma abordagem revolucionária para o problema de muitos corpos. Em 1964, eles demonstraram, por meio dos teoremas de Hohenberg-Kohn, que todas as propriedades fundamentais de um sistema de elétrons podem ser descritas unicamente pela densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$, uma função que depende de apenas três coordenadas espaciais, em con-traste com a função de onda onde muitos corpos dependem de $3N$ variáveis. Em 1965, Walter Kohn, em colaboração com Lu Sham, apresentou uma forma prática de aplicar a DFT, introduzindo o formalismo de Kohn-Sham, que tornou a teoria utilizável em cálculos computacionais com alta precisão e menor custo computacional [60].

Teoremas de Hohenberg-Kohn

A Teoria Funcional da Densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*) fundamenta-se nos teoremas de Hohenberg-Kohn, os quais estabelecem que, para um sistema de elétrons possam interagir sob a influência de um potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$, a densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$ determina de forma única todas as propriedades

do sistema, incluindo a energia total [60, 61]. De acordo com o primeiro teorema de Hohenberg-Kohn, existe um funcional de energia $E[\rho]$ tal que:

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho] + \int V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}, \quad (2.7)$$

onde:

- $T[\rho]$ é a energia cinética dos elétrons,
- $V_{ee}[\rho]$ representa a interação eletrônica (repulsão Coulombiana e correlações),
- $\int V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}$ é a energia potencial devido ao potencial externo.

O segundo teorema afirma que a energia total do sistema é minimizada pela densidade eletrônica fundamental $\rho_0(\mathbf{r})$. Assim:

$$E_0 = \min E[\rho], \quad (2.8)$$

é sujeito à condição de normalização:

$$\int \rho(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = N, \quad (2.9)$$

Onde N é o número total de elétrons. Esses teoremas permitem reformular o problema quântico de muitos corpos, originalmente descritos por uma função de onda dependente de $3N$ variáveis espaciais (para N elétrons), em termos da densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$, e depende apenas de três coordenadas espaciais. Essa abordagem torna a DFT uma ferramenta poderosa e computacionalmente eficiente para descrever sistemas eletrônicos complexos.

Sistema de Kohn-Sham

A implementação prática da teoria DFT foi feita por Walter Kohn e Lu Sham através de um sistema fictício de elétrons não interagentes, chamado de sistema de Kohn-Sham. A ideia principal é reescrever a energia total do sistema de elétrons interagentes como: [62].

$$E[\rho] = T_s[\rho] + E_{ext}[\rho] + E_H[\rho] + E_{XC}[\rho], \quad (2.10)$$

A energia total funcional da densidade pode ser decomposta em quatro termos principais: $T_s[\rho]$, que representa a energia cinética de um sistema fictício de elétrons não interagentes com a mesma densidade eletrônica do sistema real; $E_{ext}[\rho]$, correspondente à interação dos elétrons com o potencial externo, geralmente devido aos núcleos; $E_H[\rho]$, representa a energia de repulsão clássica de Coulomb entre os elétrons; e $E_{XC}[\rho]$, o termo de troca e correlação, que incorpora todos os efeitos quânticos de interação entre os elétrons não capturados pelos outros termos.

Potencial efetivo e termo de troca e correlação

O potencial efetivo, denotado por $V_{eff}(\mathbf{r})$, desempenha um papel fundamental na determinação do comportamento eletrônico de um sistema. Ele surge nas equações de um único elétron, cuja forma geral é dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

Onde $\psi_i(\mathbf{r})$ é uma função de onda associado aos orbitais ocupados e ε_i são os correspon-dentes valores de energia. O potencial efetivo $V_{eff}(\mathbf{r})$ é composto por três termos distintos:

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

O termo Vext(r) representa o potencial externo aplicado ao sistema, geralmente decor-rente da interação dos elétrons com os núcleos. O termo VH(r) corresponde à repulsão eletrostática clássica entre os elétrons, conhecida como potencial de

Hartree. Por fim, o termo VXC(r) representa os efeitos quânticos de troca e correlação, que incluem tanto a exclusão, quanto as correlações dinâmicas que não são capturadas pela abordagem clássica. Ao resolver essas equações iterativamente, por meio de um processo conhecido como auto-consistência, é possível obter funções de onda ψi(r) que reproduzem a densidade eletrônica do sistema. Essa densidade é dada pela soma das densidades de probabilidade associadas aos orbitais ocupados:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i\text{ocupados}} |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \qquad (2.13)$$

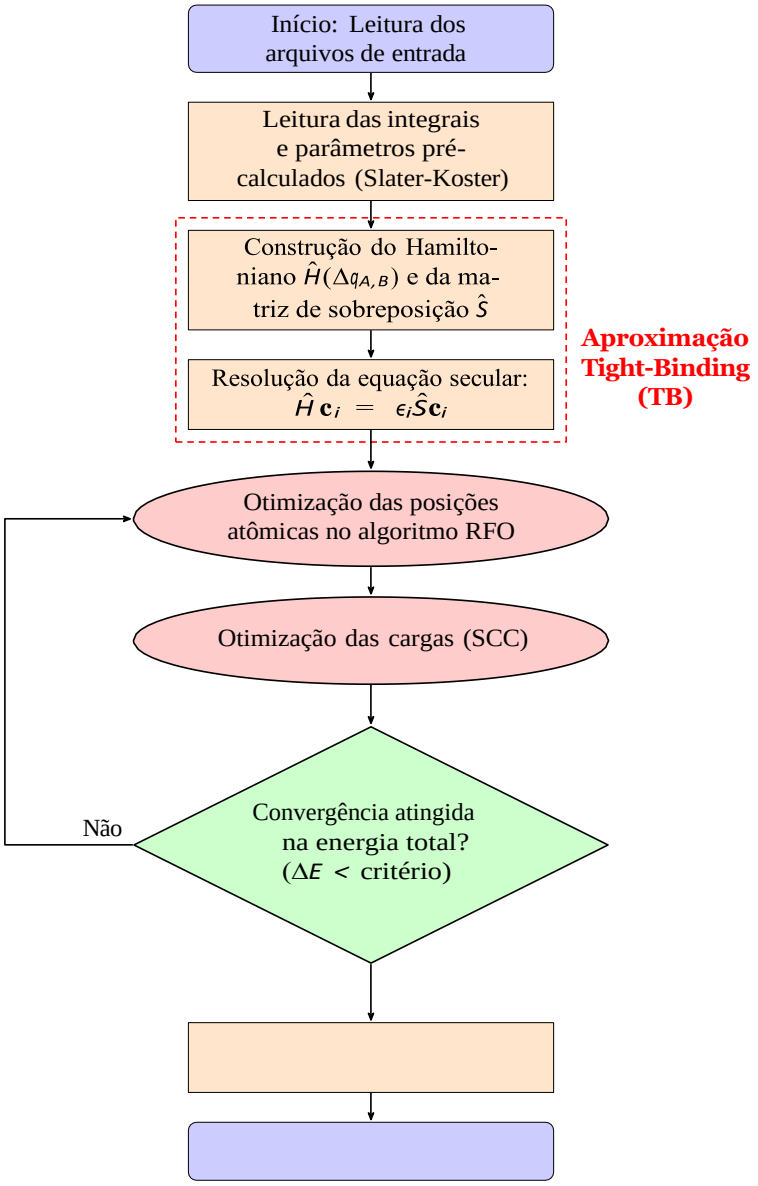
A precisão na determinação de VXC(r) é crucial, uma vez que ele incorpora os efeitos mais sutis das interações eletrônicas. Diversas aproximações são utilizadas para esse termo, sendo a escolha do funcional uma das decisões mais importantes no tratamento do sistema. A escolha da teoria funcional de troca e correlação EXC[ρ] é crucial para descrever com precisão as interações eletrônicas. Como a forma exata é desconhecida, diferentes tipos de aproximações são utilizadas, por exemplo a aproximação da Densidade Local (LDA), assume uma dependência apenas da densidade eletrônica local. A aproximação do Gradiente Generalizado (GGA) inclui a variação espacial da densidade, funcionais híbridos, do tipo B3LYP e HSE06, e ambos combinam a teoria da DFT com Hartree-Fock para maior precisão, enquanto métodos mais avançados, como Meta-GGA, incorporam a energia cinética do sistema. Essas aproximações são fundamentais para a formulação do método DFTB (Density Functional Tight Binding) deriva do método DFT, então pode-se simplificar os cálculos ao utilizar parametrizações pré-computadas para os termos de troca e correlação, reduzindo significativamente o custo computacional sem comprometer a precisão em diversos sistemas [63, 62, 61].

Desenvolvimento histórico DFTB.

O crescente interesse em simulações computacionais de sistemas moleculares e materiais com grande número de átomos impulsionou o desenvolvimento de métodos aproximados que equilibrassem precisão e eficiência computacional. Nesse contexto, o método Tight-Binding baseado na Teoria do Funcional da Densidade, conhecido como DFTB (Density Functional Tight Binding), surgiu como uma alternativa promissora. A motivação principal por trás do desenvolvimento do DFTB foi a necessidade de reduzir o custo computacional associado à resolução completa das equações de Kohn-Sham, mantendo, sempre que possível, a fidelidade dos resultados obtidos por métodos de primeiros princípios. O DFTB é uma aproximação da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) que utiliza uma expansão da energia total em torno de uma densidade eletrônica de referência. Essa abordagem permite substituir os cálculos integrais complexos da DFT por expressões analíticas mais simples, típicas do formalismo Tight-Binding, sem perder completamente a descrição quântica das interações eletrônicas seguindo do algoritmo da figura 8.

O método foi desenvolvido durante a década de 1990 por pesquisadores como Dieter Porezag, Thomas Frauenheim, Thomas Köhler e outros colaboradores. A formulação original, conhecida como DFTB de primeira ordem, foi apresentada por Porezag et al.

Figura 8 – Algoritmo do DFTB



Fonte: Elaboração Própria.

como uma tentativa de incluir os efeitos da estrutura eletrônica de forma mais precisa no formalismo Tight-Binding. Posteriormente, Frauenheim e colaboradores expandiram o método, introduzindo versões mais refinadas, como o DFTB de segunda ordem (SCC-DFTB), que inclui de forma explícita os efeitos de polarização através do acoplamento da densidade de carga. Então, o DFTB tem se consolidado

como uma ferramenta poderosa em simulações de sistemas complexos, sendo amplamente utilizado em química computacional, ciência dos materiais e biologia molecular. As aplicações abrangem desde simulações de dinâmica molecular até o estudo de propriedades eletrônicas e espectroscópicas de nano-materiais. A constante evolução do método, com o desenvolvimento de novos parâmetros e implementações, reforça a relevância como uma ponte entre métodos empíricos e ab initio.

Formalismo do DFTB

O método *Density Functional Tight Binding* (DFTB) é uma aproximação sistemá-tica da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), construída por meio de uma expansão de Taylor da energia total em torno de uma densidade eletrônica de referência $\rho_o(\mathbf{r})$. A ideia central do DFTB é manter o formalismo quântico essencial da DFT, com simplificações que possibilitam uma redução significativa no custo computacional.

Otimização com o Algoritmo RFO

O algoritmo Rational Function Optimization (RFO) é amplamente utilizado em cálculos de estrutura eletrônica para a otimização geométrica de sistemas moleculares. Diferente de métodos tradicionais baseados apenas no gradiente, o RFO utiliza uma aproximação por funções racionais para a superfície de energia potencial, garantindo maior estabilidade mesmo em regiões com curvatura negativa. Essa abordagem permite passos de otimização mais seguros e eficientes, sendo especialmente útil para encontrar mínimos de energia e estados de transição.

Expansão da energia total

A energia total de um sistema na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) é uma funcional da densidade eletrônica $\rho(r)$. No método DFTB, essa energia é aproximada por meio de uma expansão de Taylor em torno de uma densidade eletrônica de

referência ρo(r), que normalmente é construída como uma superposição das densidades eletrônicas dos átomos neutros isolados. A expansão da energia total assume a forma:

$$E_{DFTB}[\rho] = E[\rho_0] + \left(\frac{\partial E}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \delta\rho + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2}\right)_{\rho_0} (\delta\rho)^2 + \cdots, \qquad (2.14)$$

A densidade eletrônica real do sistema, representada por ρ(r), é uma função que varia enquanto é calculado, refletindo a distribuição eletrônica no estado atual do sistema. Em contraste, ρo(r) é a densidade eletrônica de referência, considerada fixa e geralmente asso-ciada a um estado conhecido ou idealizado. A diferença entre essas duas densidades, dada por δρ(r) = ρ(r) – ρo(r), define a flutuação de densidade, indicando o quanto a densidade eletrônica real se desvia da referência durante o processo de cálculo. Essa flutuação é fundamental para entender as mudanças na estrutura eletrônica e nas propriedades do sistema ao longo da simulação. A interpretação física de cada termo da expansão é a seguinte:

No modelo DFTB de primeira ordem, apenas os dois primeiros termos da expansão

- $E[\rho_0]$: Energia do sistema considerando que a densidade eletrônica permanece igual à densidade de referência.
- $\left(\frac{\delta E}{\delta \rho}\right)_{\rho_0} \delta\rho$: A Correção de primeira ordem, incorpora os efeitos de variações lineares da densidade eletrônica. Este termo está presente no DFTB de primeira ordem.
- $\frac{1}{2}\left(\frac{\delta^2 E}{\delta \rho^2}\right)_{\rho_0} (\delta\rho)^2$:A Correção de segunda ordem, associada a fenômenos mais sutis como

são considerados. Por outro lado, na versão estendida conhecida como (SCC-DFTB Self-Consistent Charge), também é incluído o termo de segunda ordem, o que permite uma descrição mais realista da interação entre cargas induzidas, particularmente em sistemas onde ocorrem transferências significativas de carga. A energia total no formalismo SCC-DFTB é expressa por:

$$E_{\text{SCC-DFTB}} = E_{\text{band}} + E_{\text{rep}} + E_{\text{coul}}, \quad (2.15)$$

Onde cada termo possui o seguinte significado:

- Energia de banda (Eband): Corresponde à soma das energias dos orbitais molecula-res ocupados, obtidas a partir de um Hamiltoniano tipo tight-binding parametrizado:

$$E_{\text{band}} = \sum_{i}^{\text{ocupados}} \langle \psi_i | \hat{H}_0 | \psi_i \rangle,$$

  sendo Hˆ0 o Hamiltoniano construído a partir de integrais entre orbitais atômicos predefinidos.
- A energia de repulsão empírica (Erep): É um termo de correção que incorpora interações repulsivas entre núcleos atômicos, bem como efeitos de sobreposição eletrônica que não são contemplados explicitamente pelo Hamiltoniano.
- A Energia coulombiana de correção de carga (Ecoul): Representa a interação entre flutuações de carga nos átomos individuais, expressa por:

$$E_{\text{coul}} = \frac{1}{2} \sum_{A,B} \gamma_{AB} \Delta q_A \Delta q_B,$$

A inclusão da correção de segunda ordem no SCC-DFTB torna o método especialmente útil para estudar sistemas com forte redistribuição eletrônica, mantendo ao mesmo tempo uma notável eficiência computacional em comparação com a DFT convencional. Assim, o SCC-DFTB estabelece como uma abordagem intermediária entre métodos puramente empíricos e ab initio, fornecendo um equilíbrio entre precisão e custo computacional em simulações de materiais e sistemas moleculares complexos.

Base atômica e matriz do Hamiltoniano

As funções de onda ψi são expandidas em uma base local de orbitais atômicos, o que permite expressar o Hamiltoniano eletrônico como uma matriz. Os elementos dessa matriz são obtidos a partir de cálculos DFT em átomos isolados e moléculas diatômicas. O problema resultante é semelhante ao problema secular em métodos de orbitais moleculares, com a diferença de que os parâmetros são derivados sistematicamente da DFT.

Auto-consistência e redistribuição de carga

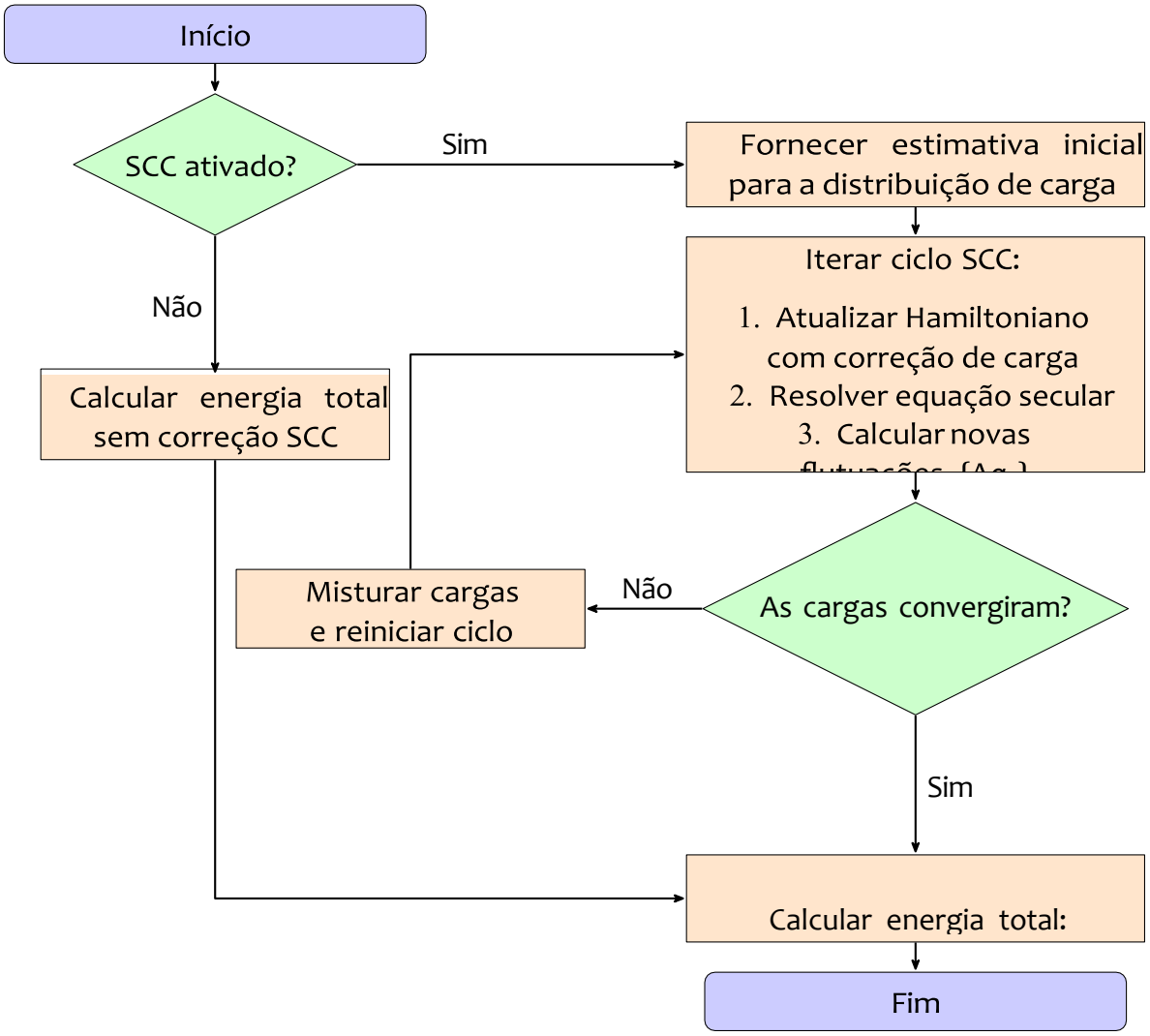
Durante a simulação, a carga total do sistema é redistribuída entre os átomos de forma auto-consistente. As flutuações de carga Δq_A são ajustadas até a minimização da energia total. Esse processo permite descrever com eficiência efeitos de polarização e transferência de carga, essenciais em sistemas com interações intermoleculares intensas ou cargas localizadas mostrado na figura 9.

Níveis de aproximação no método DFTB

O método DFTB (Density Functional Tight Binding) é uma aproximação baseada na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e reduz significativamente o custo computacional ao simplificar o cálculo das interações eletrônicas. Este método assume que a densidade eletrônica total pode ser aproximada por uma superposição das densidades atômicas, utilizando parametrizações pré-computadas para os elementos da matriz Hamiltoniana e do sobreposto, obtidas a partir de cálculos DFT em átomos e pares de átomos [64]. A energia total no DFTB é expandida em diferentes ordens: A DFTB1 considera apenas a energia da ligação entre orbitais atômicos vizinhos; A DFTB2 introduz correções de carga para modelar efeitos de polarização eletrônica; e a DFTB3 adiciona termos para capturar melhor os efeitos de correlação eletrônica e polarização,

aumentando a precisão para sistemas complexos. Essas aproximações tornam o DFTB um método eficiente para estudar sistemas

Figura 9 – Fluxo de etapas do algoritmo SCC (Self-Consistent Charge) aplicado à conver-gência de carga.



Fonte: Elaboração Própria.

de grande porte, como moléculas, biomoléculas e materiais nanoestruturados, mantendo uma boa relação entre custo computacional e precisão [65] (Diagrama o fluxograma de niveis de DFTB).

Vantagens computacionais do DFTB

Uma das principais vantagens do método DFTB é seu reduzido custo computacional em comparação com abordagens ab initio baseadas na Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Ao utilizar uma base mínima de orbitais atômicos e parametrizações pré-calculadas, o DFTB elimina a necessidade de resolver integralmente as equações de Kohn-Sham, o que resulta em tempos de cálculo significativamente menores. A escalabilidade do DFTB com o número de átomos é aproximadamente quadrática (em algoritmos otimizados, até linear em certos casos), o que contrasta favoravelmente com a escalabilidade cúbica
típica de métodos DFT convencionais. Essa característica torna o DFTB particularmente adequado para o estudo de sistemas de grande porte, como biomoléculas, agregados moleculares, superfícies, e materiais nanoestruturados. Além disso, o DFTB é compatível com simulações dinâmicas de larga escala, como a dinâmica molecular (MD), permitindo a investigação de propriedades termodinâmicas e comportamentos dinâmicos com uma precisão razoável e em escalas de tempo mais realistas do que aquelas alcançáveis com DFT completo.

O programa para simulações quânticas de sistemas atômicos DFTB+ 24.1

DFTB+ é uma ferramenta computacional, sucessor em Fortran 2003 do antigo código DFTB, utilizado para implementar a abordagem de (DFTB) *density functional based tight binding*. O código foi reescrito completamente e expandido com várias novas funcionalidades. Entre suas principais características, o DFTB+ permite cálculos não-SCC e SCC com uma gama expandida de aceleradores, simulações para sistemas moleculares e periódicos [66]. Esses cálculos podem ser feitos com uma amostragem

arbitrária de pontos k e cálculos de estrutura de bandas, condições de contorno abertas, otimização geométrica de rede, dinâmica molecular (com diferentes ensembles), cálculos de modos vibracionais numéricos, correções de dispersão (interações de van der Waals), tratamentos de elétrons f, e cálculos de resposta linear para estados estimulados. Além disso, suporta cálculos com correções LDA+U, correções híbridas de longo alcance, acoplamento QM/MM, e aceleração por GPU, OpenMP e MPI. O DFTB+ também oferece uma nova interface de entrada amigável ao usuário, alocação dinâmica de memória e ferramentas adicionais para gerar arquivos de distribuição de carga e orbitais moleculares [63, 64, 65].

Parâmetros de terceira ordem (3OB) no método DFTB

A precisão do método DFTB depende fortemente dos parâmetros que são ajustados a partir de cálculos DFT mais rigorosos, conhecidos como valores de parametrização. Esses parâmetros são essenciais, pois definem a interação entre os átomos no sistema e determinam o comportamento eletrônico do modelo [67]. Eles são obtidos de cálculos DFT mais complexos e são específicos para diferentes elementos químicos e seus pares. Ambos estão representando as energias de ligação e as integrais de sobreposição dos orbitais atômicos. A parametrização é crucial, pois a escolha de parâmetros adequados garante que as interações atômicas sejam descritas corretamente influenciando diretamente na qualidade dos resultados. No entanto como o DFTB simplifica a descrição do sistema ao usar essas parametrizações, ele pode ser menos preciso do que os métodos DFT completos. O metodo DFT é menos eficiente em sistemas onde as interações eletrônicas são mais complexas, ou quando os efeitos de correlação são fortes ou as interações não são locais. Além disso, para obter melhores resultados, as parametrizações podem ser ajustadas especificamente para diferentes tipos de materiais ou moléculas, o que exige um processo contínuo de validação e refinamento dos parâmetros, tornando

a exatidão do DFTB dependente da qualidade e da abrangência dos parâmetros utilizados [68, 69].

Teoria de carga auto-consistente (SCC) no DFTB+

No contexto do programa DFTB+, a implementação da teoria de carga auto-consistente (SCC) é um dos principais diferenciais que permite a aplicação eficiente do método DFTB em sistemas complexos. O SCC no DFTB+ é ativado por meio de configurações específicas no bloco Hamiltoniano, onde o usuário define os parâmetros de convergência, o tipo de correção de carga e o modelo de acoplamento utilizado para calcular a redistribuição de carga durante a simulação [70]. Ao habilitar o SCC, o DFTB+ recalcula iterativamente as cargas atômicas parciais com base no modelo de acoplamento de cargas, normalmente utilizando o modelo Coulombiano esfericamente simétrico. Essas cargas são atualizadas a cada ciclo de auto-consistência, até que uma condição de convergência definida (tipicamente uma diferença máxima de carga entre iterações) seja atingida [68]. Esse processo é crucial para simulações em que os efeitos de polarização eletrônica e redistribuição de densidade desempenham um papel importante nos sistemas molecula-res polares, materiais dopados ou superfícies funcionalizadas. O DFTB+ permite ajustar detalhadamente o comportamento do SCC por meio de parâmetros como SCCTolerance, MaxSCCIterations, ChargeMixing, entre outros. Esses parâmetros influenciam direta-mente na estabilidade e na velocidade de convergência do cálculo SCC. Além disso, a combinação do SCC com a parametrização de terceira ordem (3OB) aumenta considera-velmente a precisão, especialmente para interações fracas como ligações de hidrogênio e efeitos de dispersão [71]. Portanto, o módulo SCC no DFTB+ é uma ferramenta essencial para garantir maior realismo físico nos cálculos com baixo custo computacional. Ele é amplamente utilizado em simulações

de dinâmica molecular, otimizações geométricas e cálculos de energia em sistemas onde a redistribuição de carga é relevante.

Interações de dispersão de van der Waals

As interações de van der Waals são forças fracas entre moléculas ou átomos, resultantes da flutuação momentânea das distribuições eletrônicas, embora não sejam ligações químicas fortes desempenham um papel essencial na estabilidade estrutural de moléculas grandes, superfícies e materiais biológicos [72]. Os três principais tipos de interações de van der Waals são:

- **Interação de dispersão:** Acontece quando a interação de dipolos instantâneos são formados por flutuações eletrônicas, induzindo dipolos em moléculas vizinhas. Essa
- interação segue a lei $1/r^6$, onde r é a distância entre os centros atômicos [73].
- **Interação dipolo-dipolo:** Ocorre entre moléculas com dipolos permanentes, onde a força de atração ou repulsão depende da orientação molecular, decaindo com $1/r^3$.
- **Interação dipolo-induzido (Keesom):** Uma molécula polar induz um dipolo em uma molécula neutra, resultando em uma atração que segue a lei $1/r^6$.

As interações são fundamentais para diversas propriedades físicas e químicas, como a estabilidade de biomoléculas, adsorção em superfícies e propriedades termodinâmicas (densidade, viscosidade e pontos de fusão/ebulição) [74]. No contexto da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), métodos como o DFT-D3 corrigem a falta de descrição precisa dessas interações, adicionando um termo empírico para modelar a dispersão [75].

Modelagem e correções para interações de dispersão em cálculos de DFTB+

As interações de dispersão, particularmente as forças de van der Waals, representam um desafio significativo para métodos tradicionais por exemplo a Teoria Funcional da Densidade (DFT), os quais em sua formulação padrão, não descrevem adequadamente efeitos de longo alcance. Este aspecto é especialmente crítico na modelagem de siste-mas moleculares e materiais nos quais essas interações fracas desempenham um papel determinante nas propriedades estruturais, eletrônicas e termodinâmicas. Para superar essa limitação, foram desenvolvidos esquemas de correção empírica que complementam o formalismo DFT. Entre os mais amplamente utilizados destaca-se o método DFT-D3 (Density Functional Theory- Dispersion correction version 3), proposto por Grimme e colaboradores [66]. Essa abordagem adiciona um termo de correção de dispersão ao cálculo, permitindo uma descrição mais precisa das interações de van der Waals. Uma variante comum é o DFT-D3BJ, que incorpora uma função de amortecimento de Becke-Johnson, visando melhorar o comportamento da correção em curtas distâncias interatômicas. No contexto do método tight-binding baseado em DFT, como o implementado no software DFTB+, essas correções também são fundamentais. O DFTB+ oferece suporte a diferentes esquemas de correção de dispersão, incluindo DFT-D3 e suas variantes, possibilitando uma modelagem mais realista de sistemas onde as interações de dispersão são relevantes [76]. Em suma, a inclusão dessas correções é essencial para capturar adequadamente os efeitos de dispersão em simulações computacionais, especialmente em sistemas moleculares complexos.

Teoria dos parâmetros de Hubbard no método DFTB

Para melhorar a descrição da transferência de carga, o método DFTB inclui uma correção baseada no modelo de Hubbard. Essa correção é aplicada à energia eletrônica do sistema:

$$E_{\text{corr}} = \sum_{I} \frac{1}{2} U_I' \left(q_I - q_I^0 \right)^2, \qquad (2.16)$$

onde:

- q_I é a carga do átomo *I*,
- q^0 é a carga de referência do átomo neutro,
- U_I' é o parâmetro de Hubbard, ajustando a resposta da carga ao ambiente químico.

Os valores de U_I podem ser obtidos de duas formas principais:

- **Métodos empíricos**: São ajustados a partir de dados experimentais ou cálculos mais precisos para reproduzir propriedades eletrônicas conhecidas [77].
- **Cálculos ab initio**: Os cálculos ab initio significam "a partir de primeiros princípios", usam apenas constantes físicas e informações sobre o sistema (posição e número de elétrons) para modelar suas propriedades, sem parâmetros empíricos e são derivados a partir dos métodos de primeiros princípios, como DFT, garantindo maior fundamentação teórica e precisão nos resultados.

No conjunto de parâmetros **3ob** (Third Order Parameter Set) da ferramenta computacional **DFTB+**, os valores de U_I (parâmetros de Hubbard) são obtidos a partir de cálculos *ab initio*, especificamente usando o método de *Linear Response DFT*. Os parâmetros de Hubbard *U* do **3ob** foram ajustados para melhorar a descrição da transferência de carga e das interações químicas em sistemas orgânicos e biológicos [78].

Parâmetros de correção da dispersão do hidrogênio com parâmetros de repul-são

O parâmetro repulsão no DFTB+ é uma modificação essencial quando se utiliza a correção de dispersão DFTB3-D3H5. Ele ativa um termo adicional de repulsão de curto alcance entre pares de hidrogênio (H-H), evitando que esses átomos se aproximem excessivamente. Esse termo é importante para melhorar a descrição das interações de hidrogênio, que são um desafio contínuo no método DFTB devido à sua abordagem simplificada, que compromete a descrição precisa das contribuições eletrostáticas de primeira ordem. A correção DFTB3-D3H5 é uma melhoria significativa em relação à versão anterior (D3H4), pois corrige de forma mais eficaz as interações eletrostáticas, modelando empiricamente as contribuições de multipolos atômicos [79]. A polarização dos átomos ocorre diretamente no lugar de sua origem, embora simples e com menos parâmetros que o D3H4, o D3H5 é mais preciso e robusto, proporcionando erros abaixo de 1 kcal/mol em sistemas pequenos e desempenhando de uma forma eficiente em sistemas maiores. Além disso, ao contrário do D3H4, ele é capaz de descrever a cooperatividade em redes de ligações de hidrogênio, o que o torna mais transferível para sistemas mais complexos. A ativação da repulsão é importante para a modelagem realista de interações de hidrogênio e portanto, crucial para a modelagem realista de interações de hidrogênio em simulações DFTB+ [80, 81, 82].

Dinâmica molecular

A dinâmica molecular (MD) em simulações atomísticas resolve numericamente as equações de movimento de Newton para modelar a evolução temporal de um sistema de átomos ou moléculas. Define-se uma estrutura inicial, escolhe-se um potencial de interação para calcular as forças entre as partículas e integram-se as equações de movimento usando algoritmos como Verlet. Para manter condições controladas, aplicam-se termostatos e barostatos que regulam temperatura e

pressão. Por fim, analisam-se propriedades como energia, estrutura e dinâmica do sistema, permitindo o estudo de materiais, biomoléculas e processos químicos em escala atômica.

Dinâmica Molecular no método DFTB

A *Dinâmica Molecular* (MD) é amplamente utilizada para simular o comportamento de sistemas de muitos corpos em escalas atômicas e moleculares ao longo do tempo. Baseia-se na resolução numérica das equações de movimento de Newton, descritas por:

$$F_i = m_i a_i = -\nabla V(\mathbf{r}_i), \qquad (2.17)$$

onde Fi é a força atuando sobre a partícula i, mi sua massa, ai sua aceleração e V (ri) o potencial de interação do sistema. A aceleração é obtida diretamente das forças calculadas em cada passo, segundo a relação ai(t) = Fi(t)/mi. A partir dessas equações, a evolução temporal do sistema é obtida por métodos numéricos como os algoritmos de Verlet e Velocity-Verlet [83]. Essa abordagem permite a análise de propriedades estruturais, termo-dinâmicas e cinéticas, sendo amplamente aplicada no estudo de materiais, biomoléculas e sistemas complexos. As simulações de dinâmica molecular são comumente divididas em duas etapas: uma fase de equilíbrio, onde o sistema se ajusta às condições impostas, e uma fase de produção, da qual se extraem os dados estatísticos para análise das propriedades físicas. No contexto desta dissertação, a dinâmica molecular será empregada para investigar a temperatura de dessorção do hidrogênio em folhas de *γ*-grafino decoradas com metais alcalinos, utilizando o método *Density-Functional Tight-Binding* (DFTB) para a descrição das interações interatômicas. O método DFTB permite uma descrição quântica eficiente das interações interatômicas por meio de uma aproximação ao DFT, onde os orbitais atômicos são pré-parametrizados. Isso reduz significativamente o custo

computacional, permitindo simulações em escalas de tempo maiores que métodos *ab initio* tradicionais, mantendo uma boa acurácia em sistemas com ligações covalentes. Para garantir a acurácia dos resultados, foram utilizados conjuntos de parâmetros Slater-Koster validados para os elementos presentes (H, C, Na, K, Li), considerando a relevância das interações de carga em processos de adsorção e dessorção. Os resultados obtidos auxiliarão na compreensão da estabilidade do sistema e na determinação da temperatura na qual ocorre a dessorção, conforme a equação de Van't Hoff [84].

Algoritmos de Verlet na dinâmica molecular

Os algoritmos de Verlet constituem uma classe de métodos numéricos amplamente utilizados em simulações de dinâmica molecular para a integração das equações de movi-mento de Newton. Entre suas principais qualidades destacam-se a boa conservação da energia total do sistema ao longo do tempo e a simplicidade de implementação, o que os torna particularmente atrativos em simulações de sistemas complexos.

Formulação Clássica do Método de Verlet

O método original de Verlet calcula a nova posição das partículas com base em uma expansão de Taylor de segunda ordem, utilizando as posições conhecidas nos instantes anteriores e a aceleração atual. Este procedimento elimina a necessidade de armazenar ou atualizar explicitamente as velocidades, o que pode ser proveitoso do ponto de vista computacional. A equação fundamental é dada por:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \mathbf{a}(t),$$

(2.18)

onde $\mathbf{r}(t)$ representa a posição da partícula no tempo t, $\mathbf{a}(t)$ é a aceleração resultante das forças atuantes, e Δt é o intervalo de tempo entre os passos da simulação. Apesar da eficiência na conservação de energia, a ausência explícita das velocidades pode ser uma limitação para o cálculo de grandezas termodinâmicas ou quando se deseja acoplar termostatos que exigem informação sobre as velocidades [85].

Extensão Velocity-Verlet com Cálculo Explícito de Velocidade

O algoritmo *Velocity-Verlet* é uma extensão do método de Verlet tradicional, projetada para resolver essa limitação. Ele fornece uma maneira direta de calcular as velocidades, o que o torna mais apropriado para simulações que envolvem controle de temperatura ou o cálculo de propriedades dinâmicas. A atualização das posições e velocidades é feita em dois passos complementares:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2,$$

(2.19)

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}[\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)]\,\Delta t.$$

(2.20)

Esse método oferece uma conservação da energia comparável ao algoritmo de Verlet padrão, mantendo ao mesmo tempo a informação explícita das velocidades. Por essa razão, o método Velocity-Verlet é amplamente utilizado em códigos de simulação de dinâmica molecular modernos [86].

Controle de temperatura e pressão

Em simulações de Dinâmica Molecular, é essencial monitorar a temperatura e a pressão do sistema para reproduzir condições experimentais específicas ou manter equilíbrios termodinâmicos. Para isso, utilizam-se termostatos para o controle de temperatura e barostatos para o controle da pressão [87].

Termostatos Nosé-Hoover

Em simulações no ensemble NVT (Número de partículas, Volume e Temperatura constantes), a temperatura do sistema é regulada através de termostatos que ajustam as velocidades das partículas para manter a temperatura-alvo [88]. O Nosé-Hoover é um dos principais termostatos utilizados em simulações de dinâmica molecular. Ele introduz uma variável dinâmica adicional que atua como um reservatório térmico, permitindo controlar a temperatura do sistema e assegurar a correta amostragem do ensemble canônico [89]. A equação de movimento modificada assume a forma:

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i - \zeta \mathbf{p}_i, \qquad (2.21)$$

em que ζ representa o parâmetro de acoplamento responsável por ajustar a taxa de troca de energia entre o sistema e o termostato [90, 91].

Barostatos Berendsen

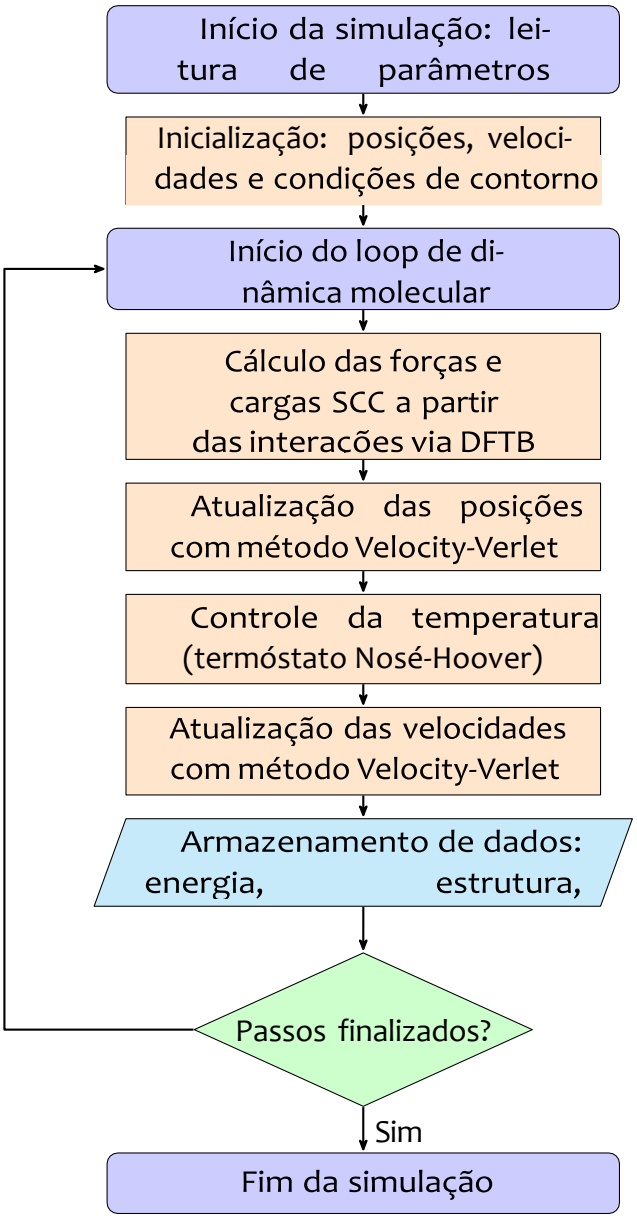
Em simulações no ensemble NPT (Número de partículas, Pressão e Temperatura constantes), a pressão do sistema é regulada por algoritmos chamados *barostatos*, os quais controlam o volume da caixa de simulação de modo que a pressão média atinja um valor desejado. Esses mecanismos permitem que se reproduza um ambiente termodinâmico mais realista, especialmente em estudos de fases ou propriedades mecânicas de materiais [88].

O Berendsen é um dos principais barostatos utilizados, pois permite uma adaptação gradual da pressão do sistema para um valor-alvo P_0, de maneira análoga ao termostato correspondente, suavizando flutuações e facilitando a estabilização da pressão durante simulação. A taxa de ajuste da pressão segue a equação:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{P_0 - P}{\tau_P}, \qquad (2.22)$$

onde τ_P é o tempo de relaxação da pressão. Embora este método seja eficiente para atingir rapidamente a pressão desejada, ele não gera distribuições estatisticamente rigorosas das flutuações de volume e, portanto, pode não representar com exatidão o ensemble NPT [92].

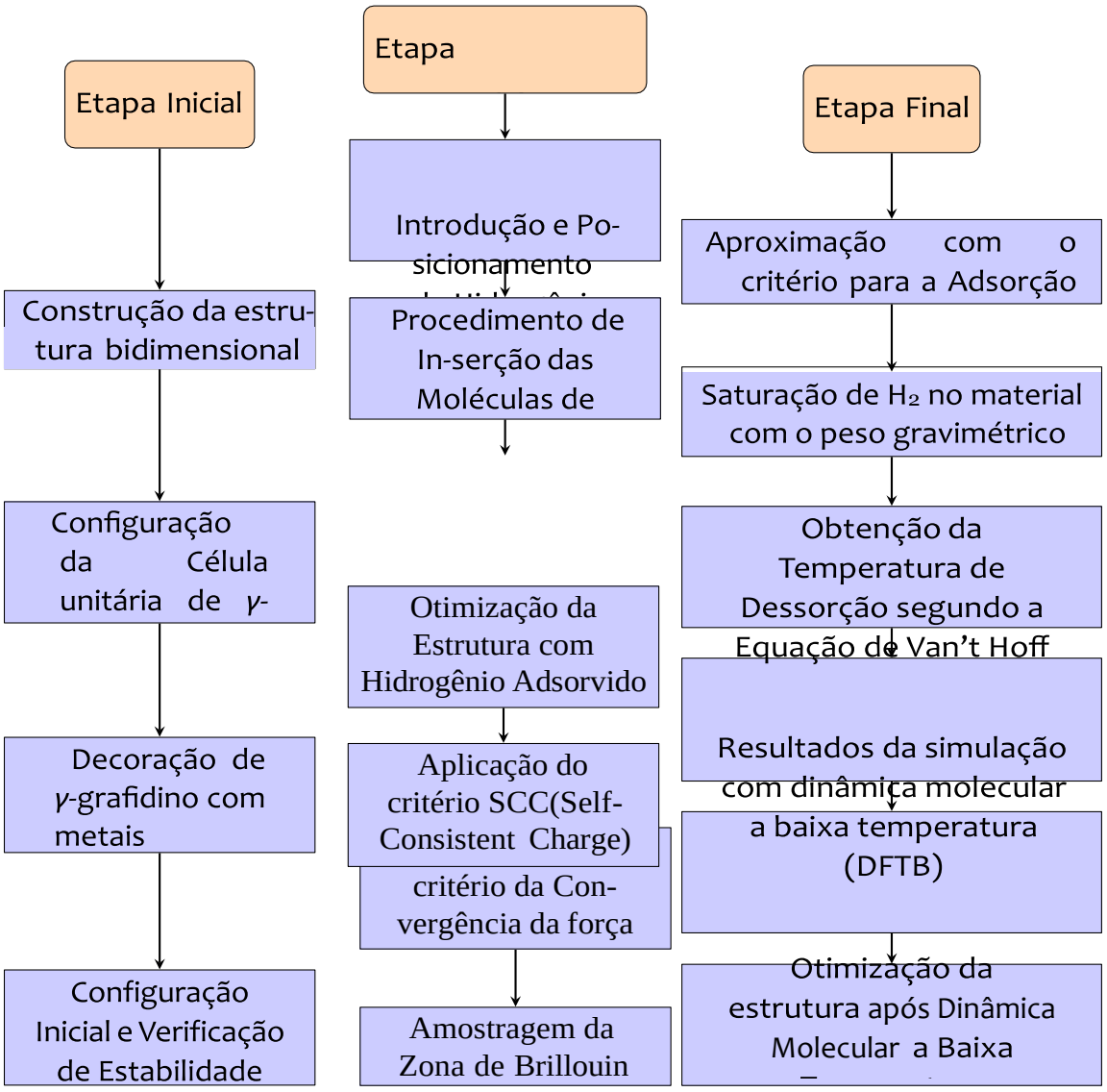
Figura 10 – Funcionamento da simulação de Dinâmica Molecular via DFTB com controle de temperatura.



Fonte: Elaboração própria.

METODOLOGIA

Figura 11 – Etapas da Metodologia do desenvolvimento da pesquisa



Fonte: Elaboração própria

A metodologia adotada neste trabalho é organizada em três etapas principais como se mostra na Figura 11:

- Construção e preparação da estrutura: Inicialmente, constrói-se a estrutura bidimen-sional de γ-grafidino e define-se a supercélula correspondente. Em seguida, realiza-se a decoração da estrutura com metais alcalinos e a configuração inicial das diferentes estruturas, após a verificação de sua estabilidade.
- Adsorção de hidrogênio e otimização: Nesta fase, posicionam-se e adsorvem-se molé-culas de hidrogênio na estrutura, seguidas da otimização da geometria com hidrogênio adsorvido. Durante a otimização, aplicam-se o critério SCC (Self-Consistent-Charge), o critério de convergência de forças e a amostragem da zona de Brillouin.
- Simulação e análise de resultados: Por fim, aplica-se o critério de adsorção de H_2 e realiza-se a saturação do material conforme o peso gravimétrico correspondente. Determina-se a temperatura de dessorção via equação de Van't Hoff e executam-se simulações de dinâmica molecular a baixa temperatura (DFTB). Após nova otimização da estrutura, obtêm-se os resultados finais das simulações, incluindo a rampa de aquecimento, conforme detalhado no Capítulo 4.

Construção da estrutura bidimensional

A construção dessas estruturas geralmente é realizada por meio de ferramentas computacionais que permitem o desenho de redes periódicas em escala atômica. Para esse fim, utilizam-se programas como o Avogadro, o gabedit ou mesmo scripts personalizados, que possibilitam a definição da célula unidade e dos vetores de rede. As estruturas geradas podem ser exportadas em formatos compatíveis com simuladores baseados em métodos semi-empíricos, sendo particularmente útil na modelagem de materiais bidimensionais baseados em carbono, grafeno e seus derivados.

Célula unitária de γ-grafidino

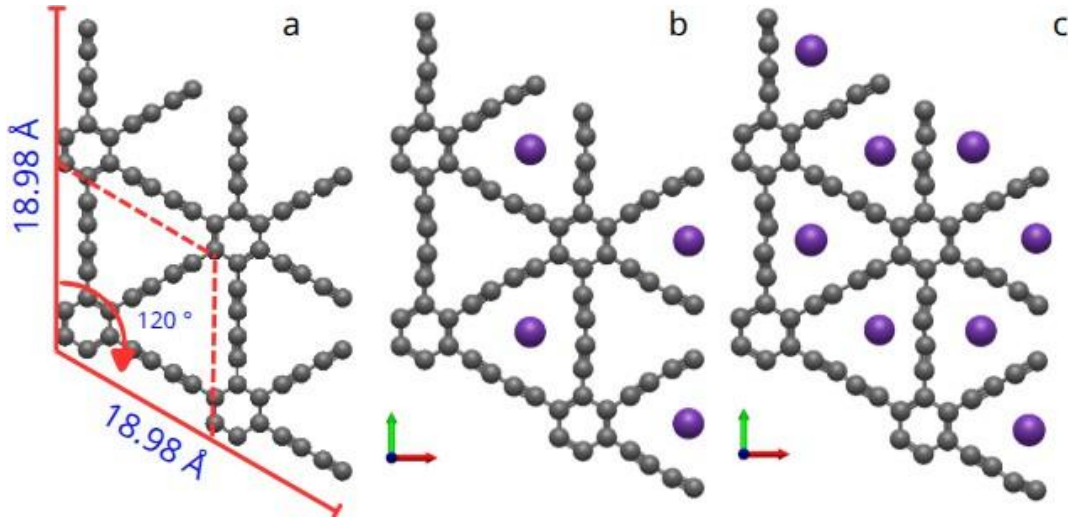
Das muitas variedades de estruturas que existem, optou-se pelo estudo de γ-grafidino. A modelagem da estrutura foi realizada utilizando uma base unitária composta por 18 átomos de carbono, garantindo uma configuração otimizada que respeita as distâncias de ligação e os ângulos característicos dessa rede cristalina.

Supercélula do γ-grafidino

Para a modelagem do sistema base, foi construída uma supercélula 2 × 2 a partir da célula unitária do γ-grafidino. A escolha dessa multiplicação visa aumentar o tamanho da célula simulada, permitindo, dessa forma, a inserção de hidrogênios de forma consecutiva, sem interferência artificial entre as imagens periódicas. A célula do γ-grafidino utilizada possui uma área de aproximadamente 314,29 $Å^2$, com vetores de rede de comprimento $a = b = 18,98$ Å e ângulo interno de 120°, refletindo a simetria hexagonal do material, resultado da formação da supercélula. O uso de uma supercélula maior possibilita uma análise mais realista dos efeitos locais causados pela adsorção de hidrogênio e pela presença de decorantes, garantindo simultaneamente o espaçamento suficiente para evitar interações artificiais entre sítios ativos e suas imagens periódicas. Essa abordagem é particularmente importante para simulações com métodos de dinâmica molecular e para a análise da estabilidade estrutural após a funcionalização.

Figura 12: Estruturas do γ-grafidino com supercélula 2×2: a) configuração não decorada; b) decorada com metal alcalino na vacância V1; c) decorada nas vacâncias V1 e V2.

Fonte:



Elaboração própria.

Decoração de γ-grafidino com metais alcalinos

Após a construção do γ-grafidino, a estrutura foi expandida em uma supercélula 2 × 2. Foram selecionados metais alcalinos do grupo 1 da Tabela Periódica devido à característica de possuírem o último orbital eletrônico do tipo sp^1, o que implica baixa eletronegatividade e baixa energia de ionização. Dessa forma, átomos de sódio (Na), potássio (K) e lítio (Li) foram inseridos nas vacâncias do γ-grafidino, originando uma nova variedade de estruturas.

No entanto, no conjunto de parâmetros 3OB, existem restrições associadas às interações entre determinados elementos. Em particular, não há parâmetros disponíveis para o potencial do Li em interação com as espécies K e Na. Assim, as interações K–Li e Na–Li não estão parametrizadas nesse conjunto, impossibilitando a realização das simulações correspondentes.

Configuração inicial e verificação de estabilidade

As posições iniciais dos decorantes foram ajustadas para favorecer interações químicas com os átomos de carbono da folha. A estrutura funcionalizada resultante

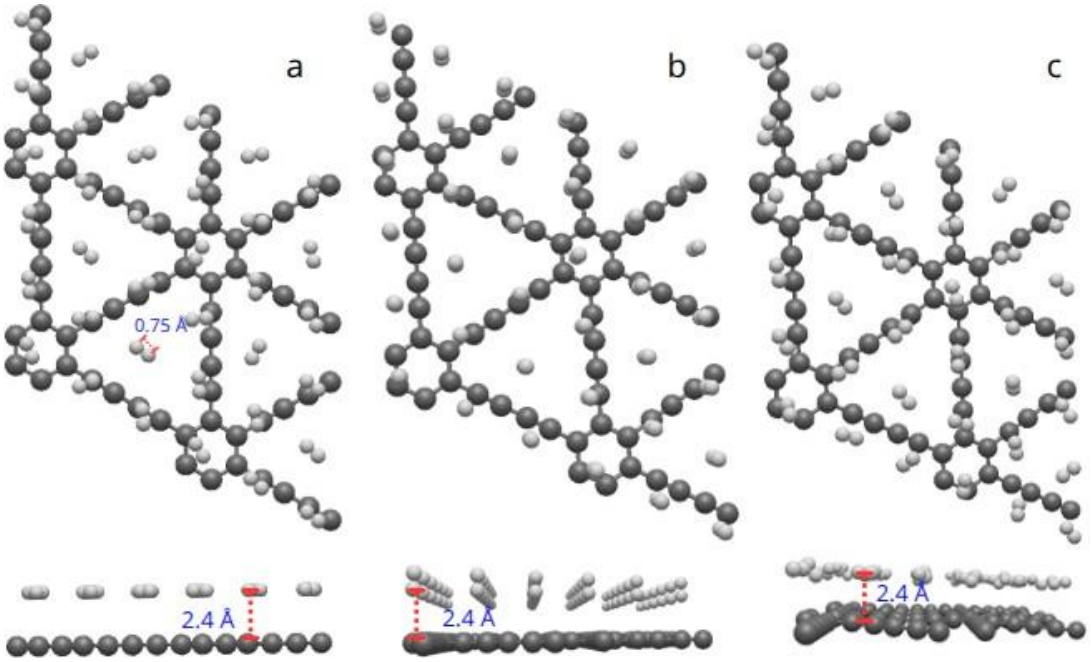
foi verificada juntamente com a integridade geométrica antes da introdução de moléculas decorantes.

Introdução e posicionamento de H_2

Neste trabalho, moléculas de hidrogênio molecular (H_2) foram adsorvidas sobre as estruturas geradas após o processo de decoração descrito na Seção **??**. O posicionamento dos hidrogênios foi planejado de maneira a abranger diferentes configurações, começando por casos extremos até situações intermediárias. Foram consideradas três orientações principais para o arranjo das moléculas:

- **Configuração paralela (deitada)**: Refere-se a moléculas orientadas com o eixo principal paralelo ao plano da estrutura.
- **Configuração perpendicular (em pé)**: Todas as moléculas orientadas com o eixo principal perpendicular ao plano da estrutura.
- **Configuração mista**: Onde as moléculas são posicionadas de maneira aleatória, variando entre as orientações paralela e perpendicular.

Figura 13 – Posicionamento da direção das moléculas de H_2 adsorvidas sobre o γ-grafidino com supercélula 2×2, nas configurações: a) horizontal; b) vertical; c) aleatória.



Fonte: Elaboração própria.

Essa abordagem permitiu simular diferentes cenários de interação física entre o hidrogênio e a superfície decorada, buscando capturar as situações de maior interesse prático para aplicações em armazenamento de hidrogênio.

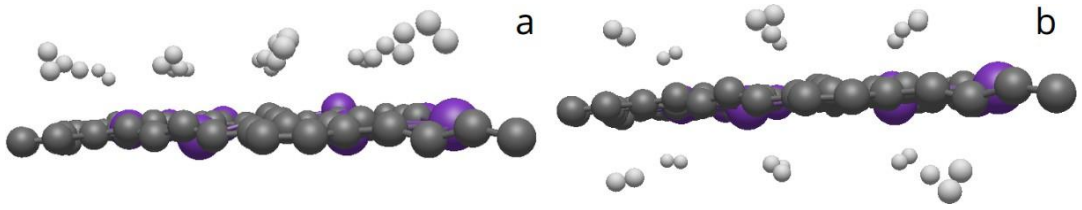
Procedimento de inserção das moléculas de hidrogênio

Para avaliar corretamente a interação entre o hidrogênio e as superfícies decoradas, foi necessário realizar a adsorção de moléculas de H_2 de forma progressiva e controlada. As moléculas foram inseridas uma a uma, buscando sempre a melhor distribuição espacial possível, dessa forma evitar aglomerações locais e garantir uma cobertura uniforme da superfície. Foram consideradas duas situações distintas para o posicionamento das moléculas:

- **Monocamada**: Moléculas de hidrogênio adsorvidas apenas sobre a face superior da estrutura decorada.

- **Bicamada:** Moléculas de hidrogênio adsorvidas simultaneamente sobre as faces superior e inferior da folha de γgrafino decorado.

Figura 14: Posicionamento das moléculas de H_2 sobre o sistema γ-grafidino + Na + Na: a) monocamada, com adsorção apenas na superfície superior; b) bicamada, com adsorção nas superfícies superior e inferior.



Fonte: Elaboração própria.

A diferença entre a monocamada e a bicamada permitiu uma análise mais completa do potencial de armazenamento das folhas funcionais, levando em conta variações na ocupação espacial e nas condições de operação prática.

Otimização da estrutura com hidrogênio adsorvido

A otimização das geometrias com hidrogênio adsorvido foi realizada utilizando o programa DFTB+, conforme descrito na Seção 2.8. O objetivo dessa etapa é encontrar a configuração de menor energia total do sistema, garantindo uma estrutura estável sob os critérios físicos definidos.

Critério de SCC

Durante o processo de otimização, foi ativada a opção de carga auto-consistente (Self-Consistent Charge, SCC), que considera os efeitos de redistribuição de carga

entre os átomos. O critério de convergência adotado para esse ciclo foi definido por meio do parâmetro:

$$\text{SCCTolerance} = 1 \times 10^{-6} e2$$

Esse valor representa o limite máximo permitido para a variação da carga entre duas iterações consecutivas do ciclo SCC. Em outras palavras, o ciclo de carga é considerado convergido quando a diferença na distribuição de carga total entre iterações sucessivas é inferior a 10^{-6} elétrons. Esse critério é essencial para garantir que a solução do sistema de equações de carga atinja estabilidade eletrônica antes de proceder a cada etapa da otimização geométrica.

Critério da convergência da força

Para a convergência geométrica, adotou-se como critério principal o valor máximo permitido para o módulo do gradiente da energia total em relação às coordenadas atômicas individuais, definido por:

$$\text{GradElem} = 1 \times 10^{-5} \text{ Ha/Bohr}$$

Esse valor estabelece que a otimização é considerada convergida quando a força residual sobre cada átomo é inferior a 10^{-4} Hartree por bohr. É possível afirmar que todos os átomos estejam suficientemente próximos de um ponto mínimo local da superfície de energia potencial, representando assim uma estrutura fisicamente estável. Os parâmetros escolhidos refletem um equilíbrio entre precisão e viabilidade computacional, tornando-se apropriados para simulações envolvendo sistemas moleculares e materiais bidimensionais com adsorção do tipo físico-química, como o γ-grafidino decorado com metais alcalinos e funcionalizado com moléculas de hidrogênio.

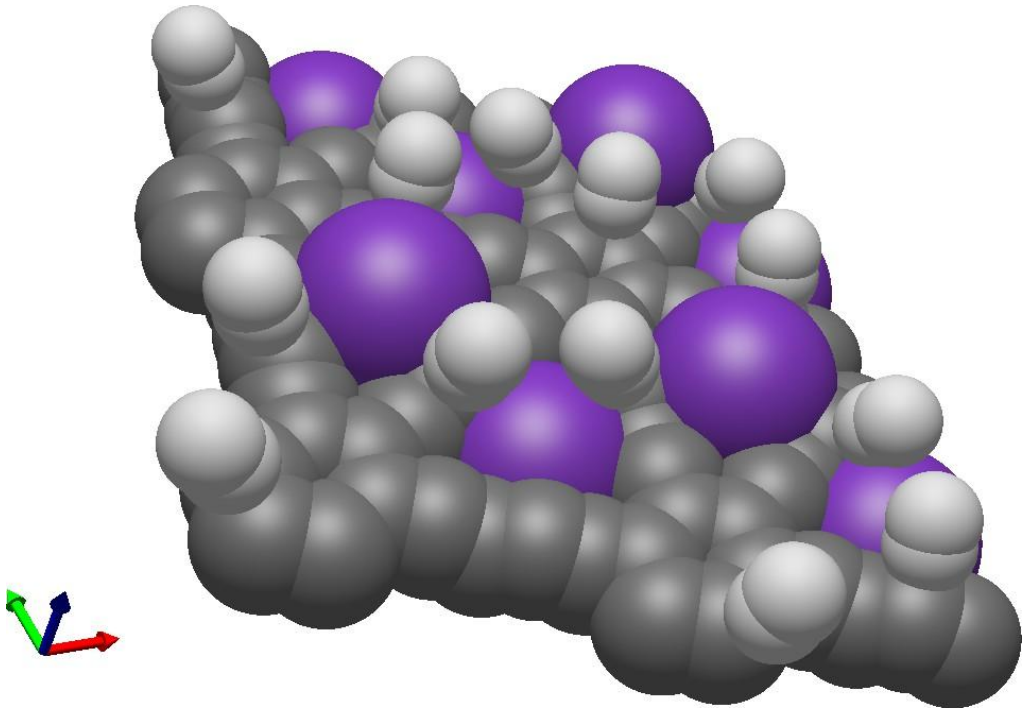
Amostragem da zona de Brillouin

Para a amostragem da zona de Brillouin, foi utilizada uma malha uniforme de pontos k com densidade 5 ×5 ×1 de pontos K descrita na seção 2.3. Esse valor foi escolhido considerando o caráter bidimensional da estrutura simulada, que representa periodicidade apenas nos planos *x* e *y*, e vácuo suficiente na direção *z* para evitar interações espúrias entre as imagens periódicas da folha de *γ*-grafidino. A densidade 5 × 5 nos planos *x* e *y* garante uma amostragem adequada da estrutura eletrônica no espaço recíproco, permitindo capturar corretamente variações no potencial e nas distribuições de carga geradas pelas interações de adsorção com metais alcalinos e moléculas de hidrogênio. Por outro lado, o uso de apenas um ponto na direção *z* ($k_z = 1$) é suficiente para sistemas bidimensionais com vácuo, pois não há dispersão significativa de bandas nessa direção. Testes prévios com malhas mais densas (como 6 × 6 × 1 ou 7 × 7 × 1) mostraram que as variações na energia total e nas forças atômicas foram insignificantes, enquanto o custo computacional aumentou de forma significativa. Assim, a escolha de uma malha 5 × 5 × 1 representa um bom compromisso entre precisão e eficiência, sendo adequada para cálculos de otimização estrutural em materiais bidimensionais baseados em carbono.

Critério para adsorção de H_2

Para determinar se as moléculas de H_2 estão efetivamente adsorvidas na estrutura, adotou-se como critério a distância intermolecular, baseada no raio de van der Waals (Seção 2.4). Esse critério garante que a separação entre as moléculas de H_2 e a superfície do material esteja dentro da faixa de atuação do fenômeno de fissão física, refletindo uma aproximação realista e energeticamente viável para o armazenamento.

Figura 15: Adsorção H_2 sobre γ-grafidino+Na+Na colocando em evidencia os raios de Van der Waals.



Fonte: Elaboração própria.

Saturação de H_2 do material e peso gravimétrico

O processo de colocação do H_2 é otimizado considerando as possibilidades descritas de monocamada e bicamada (Seção 3.2), adicionando H_2 progressivamente até a saturação máxima de adsorção para as estruturas puras e decoradas (Seção 3.1), respeitando a estabilidade das interações físicas predominantes, especialmente as forças de van der Waals (Seção 2.4).

Temperatura de dessorção segundo a Equação de Van't Hoff

Para obter a temperatura de dessorção do hidrogênio, é fundamental extrair a energia final após ser otimizada, utilizando a equação 2.2 (Van't Hoff), que relaciona a constantes de equilíbrio do processo de adsorção de H_2 com os valores dos parâmetros termodinâmicos constantes.

Dinâmica molecular a baixa temperatura (DFTB)

Com o intuito de avaliar a estabilidade e o comportamento das moléculas de H_2 adsorvidas na superfície do material, foi realizada uma simulação de dinâmica molecular utilizando o método DFTB+ com uma temperatura de 30 K. A escolha de uma tem-peratura tão baixa visa minimizar a contribuição térmica excessiva e observar possíveis reordenamentos naturais das moléculas de hidrogênio em busca de configurações energeti-camente mais favoráveis. Na simulação, monitorou-se a posição relativa das moléculas de H_2 com relação à superfície, analisando-se, ao longo do tempo, as moléculas permaneciam dentro da faixa de distância definida pelo critério de adsorção baseado nos *raios de Van der Waals* (Seção 2.4). Esse procedimento permitiu verificar se todas as moléculas inicial-mente posicionadas e as adsorvidas mantinham tal condição após o reequilíbrio estrutural, confirmando assim a validade e a estabilidade do modelo de adsorção adotado.

Otimização da estrutura após dinâmica molecular a baixa temperatura

Após a simulação de dinâmica molecular em baixa temperatura, foi realizada uma nova etapa de otimização estrutural, seguindo os mesmos parâmetros descritos na Seção 3.3, com o objetivo de refinar a geometria final do sistema. Esse procedimento tem como finalidade eliminar possíveis forças residuais da etapa de dinâmica molecular. Nesse contexto, existe uma ferramenta para garantir uma

configuração final mais estável e fisicamente coerente para as análises subsequentes.

Dinâmica molecular com rampa de aquecimento

Após a criação das estruturas otimizadas na Seção 3.5, foi realizada uma dinâmica molecular com aquecimento gradual do sistema, aumentando a temperatura até atingir o ponto em que o H_2 deixa de interagir com a estrutura. Adotou-se como critério a distância intermolecular, baseada na Seção 2.4, para gerar os resultados, os quais são descritos nos gráficos e tabelas no capítulo seguinte.

RESULTADOS

Avaliação estrutural dos γ-Grafinos

A primeira etapa deste trabalho baseou-se na caracterização das estruturas dos diferentes tipos de γ-grafinos considerados: γ-grafino γ-grafidino, γ-grafitrino e γ-grafiquatrino. Após a construção e relaxamento geométrico das supercélulas, calculou-se as energias de formação para cada uma das estruturas, empregando a equação 2.1. Os valores obtidos estão apresentados na Tabela 2, para supercélulas com fator de repetição 1x1, 2x2, 3x3 e 4x4.

Tabela 2 – Energia de formação das estruturas de γ–grafinos em diferentes tamanhos de supercélulas.

Estrutura	E_{form} 1x1 (eV)	E_{form} 2x2 (eV)	E_{form} 3x3 (eV)	E_{form} 4x4 (eV)
γ-grafino	-8,15838	-8,15832	-8,15410	-8,15832
γ-grafidino	-8,01140	-8,01143	-8,01142	-8,01143
γ-grafitrino	-7,93745	-7,93744	-7,93744	-7,93744
γ-grafiquatrino	-7,89572	-7,89573	-7,89573	-7,89573

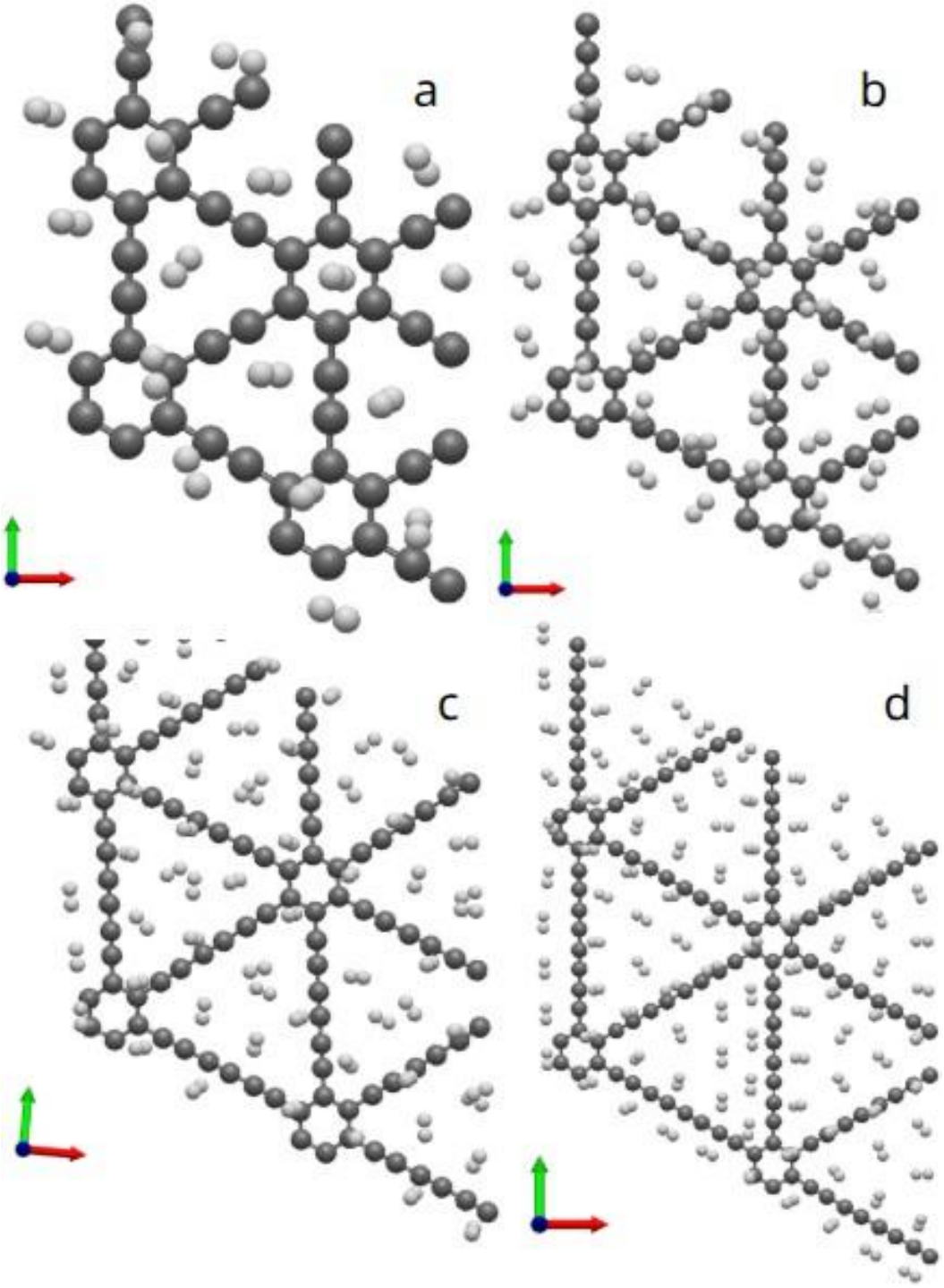
Fonte: Elaboração própria.

Os resultados mostram que, em geral, as energias de formação se mantêm bastante estáveis ao aumentar o tamanho da supercélula. Essa estabilidade é indicativa da convergência dos cálculos em relação ao tamanho da célula periódica, o que valida a confiabilidade dos resultados obtidos para células maiores. O γ-grafino apresenta a menor energia de formação entre as estruturas analisadas, sugerindo maior estabilidade termodinâmica relativa.

Por outro lado, o γ-grafiquatrino exibe a maior energia de formação (menos negativa), o que indica que essa estrutura é energeticamente menos favorável. A pequena variação entre os valores obtidos para as supercélulas maiores (3x3 e 4x4) indica que as interações de borda e os efeitos periódicos já estão suficientemente amortecidos, e que as propriedades energéticas intrínsecas da estrutura já podem ser consideradas para serem analisadas.

A análise comparativa entre os diferentes γ-grafinos permite observar que, à medida que a estrutura se torna mais complexa (com maior número de ligações triplas), a energia de formação tende a aumentar (tornar-se menos negativa). Isso pode estar relacionado com o aumento da tensão estrutural interna ou com a menor densidade de ligações conjugadas eficientes.

Figura 16 – Distribuição da monocamada de H_2 no ponto de saturação máxima sobre as estruturas: a) γ-grafino; b) γ-grafidino; c) γ-grafitrino; d) γ-grafiquatrino.



Fonte: Elaboração própria.

Análise da adsorção e saturação de hidrogênio H_2 em superfícies de γ-grafinos

Com as estruturas otimizadas e cuja estabilidade foi confirmada, as moléculas de hidrogênio H_2 foram posicionadas a uma distância de 2, 4 Å da superfície, de forma sequencial, até atingir a saturação máxima, como mostrado na Figura 16. Em seguida, realizou-se o cálculo dos pesos gravimétricos apenas quando o material atingiu o ponto de saturação de H_2 para os γ-grafinos. Comparando o posicionamento inicial das moléculas de hidrogênio H_2, antes da otimização, os resultados dos pesos gravimétricos são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: Valores de peso gravimétrico calculados para estruturas de γ-grafinos com adsorção de H_2 em monocamada e bicamada, utilizando supercélulas 2×2.

Estrutura	**%wt Monocamada**			**%wt Bicamada**		
	Horizontal	Vertical	Aleatório	Horizontal	Vertical	Aleatório
γ-grafino	6,189	6,189	6,189	11,656	11,656	11,656
γ-grafidino	8,475	8,475	8,475	14,793	14,793	14,793
γ-grafitrino	10,140	10,140	10,140	18,414	18,414	18,414
γ-grafiquatrino	12,195	12,195	12,195	21,739	21,739	21,739

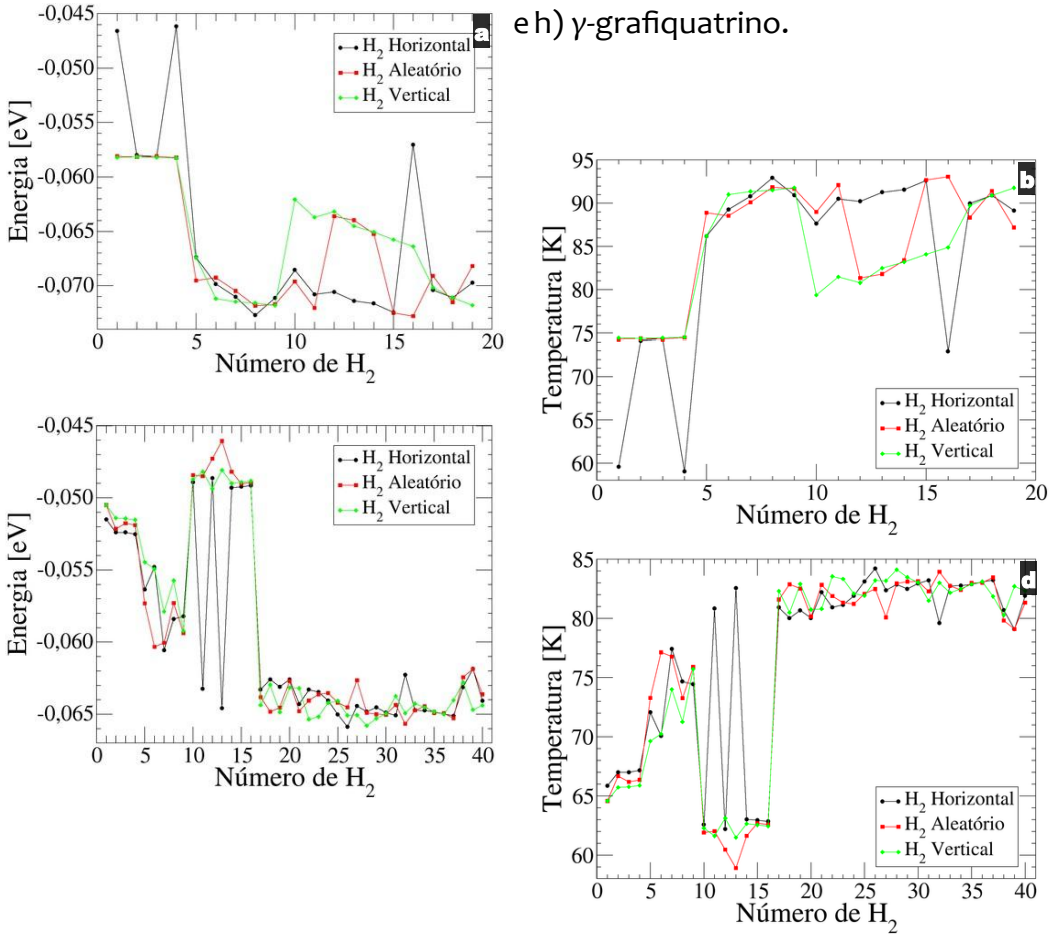
Fonte: Elaboração própria.

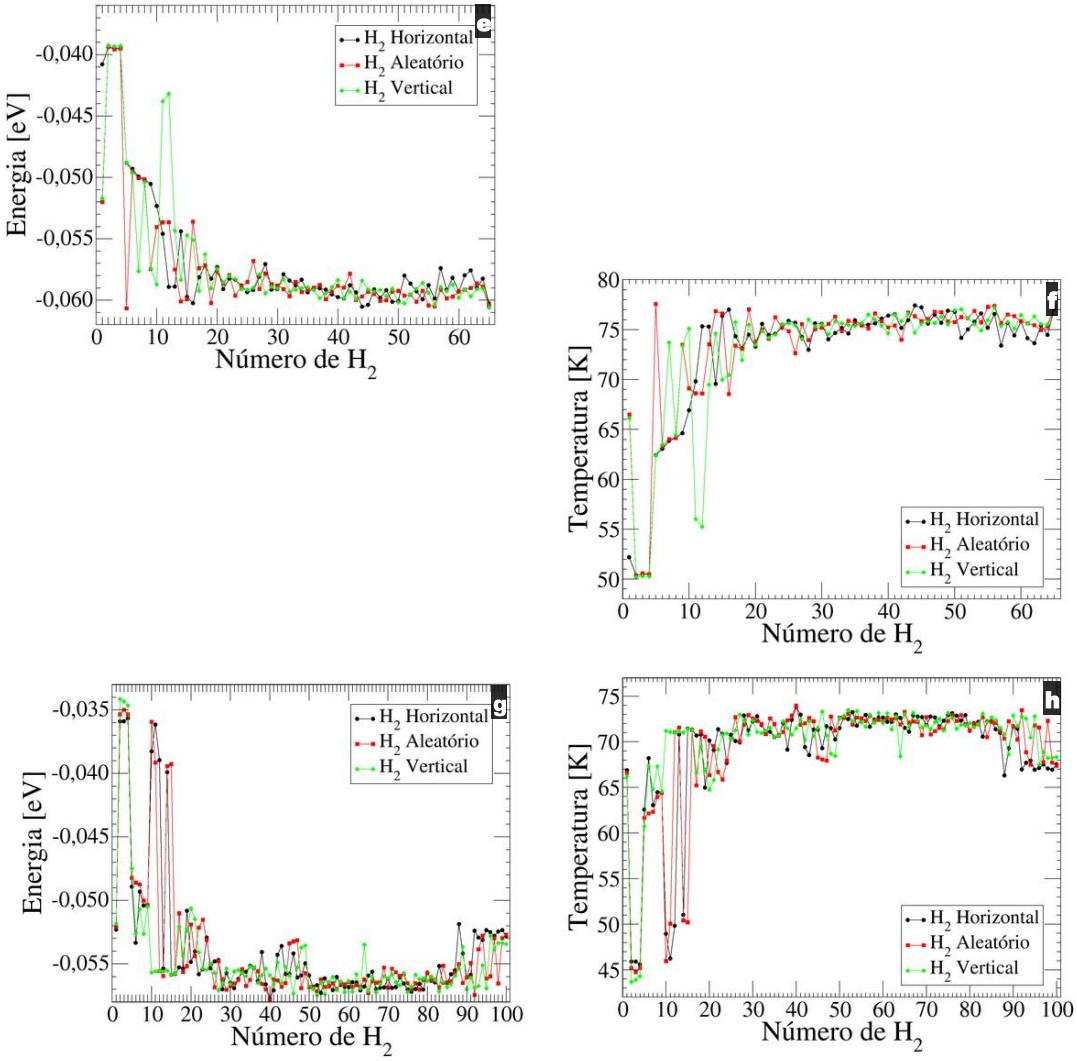
Os resultados obtidos indicam que os γ-grafinos permanecem estruturalmente estáveis mesmo após a introdução de moléculas de H_2 sobre suas superfícies. Verificou-se que as estruturas apresentam uma área superficial maior devido à presença de um maior número de ligações triplas, as quais permitem a inserção de uma quantidade superior de moléculas de H_2, que contém dentro dessas vacâncias. Essa característica contribui para uma maior capacidade de saturação, sem comprometer a integridade estrutural do material, conforme ilustrado na Figura 16.

A energia média de adsorção é obtida conforme a Equação 2.5. A estimativa da temperatura de dessorção foi feita a partir da expressão de Van't Hoff (Equação 2.2), que relaciona as variações termodinâmicas do processo à constante de equilíbrio. Para o γ-grafino (Figura 17a–b), a adsorção inicial apresenta energia de −0,058 eV por molécula de H_2, que se torna progressivamente mais favorável com o aumento do número de moléculas, convergindo para um valor médio próximo de −0,070 eV à medida que a superfície se aproxima da saturação. O perfil estimado da temperatura de dessorção (Figura 17b) reflete essa tendência: a temperatura inicia aproximadamente em 75 K e converge para cerca de 95 K próximo à saturação.

No γ-grafidino (Figura 17c–d) observou-se uma energia média de adsorção inicial de −0,050 eV. A curva de energia apresenta flutuações pronunciadas na faixa de 10 a 16 moléculas de H_2, fenômeno que atribuímos à acomodação das moléculas nas vacâncias de maior dimensão e à sensibilidade da interação com a orientação do H_2. Apesar dessa

Figura 17 – Perfis de energia de adsorção média e temperatura de dessorção com monoca-mada de H_2 para estrutura: a) e b) γ-grafino; c) e d) γ-grafidino; e) e f) γ-e h) γ-grafiquatrino.





Fonte: Elaboração própria.

irregularidade, a energia média tende a convergir para cerca de −0,066 eV próximo à saturação. O correspondente perfil de temperatura de dessorção inicia em aproximadamente 65 K e, após a região instável (10–16 moléculas), converge para ~ 83 K ao aproximar-se da saturação.

De modo análogo, o γ-grafidino (Figura 17e–f) apresenta uma energia de adsorção inicial de −0,053 eV, estabilizando-se em torno de −0,058 eV à medida que o número de moléculas de H_2 adsorvidas aumenta. Nesta estrutura, a vacância é mais ampla,

conferindo maior liberdade de posicionamento para as moléculas de H_2, o que resulta em variações energéticas menos acentuadas do que no grafidino. O perfil de temperatura de dessorção associado converge para aproximadamente 75 K.

Por fim, o γ-grafiquatrino (Figura 17g–h) exibe comportamento atípico na faixa de 10 a 16 moléculas de H_2, onde a tentativa de acomodar mais de três moléculas na mesma vacância gera interações repulsivas, especialmente quando a orientação inicial das moléculas é horizontal ou aleatória. A presença das moléculas de H_2 nas vacâncias gera variações notáveis na curva energética, devido à repulsão intermolecular ao se acomodarem nesses espaços. À medida que o sistema se aproxima da saturação, a energia de adsorção converge para −0,056 eV e a temperatura de dessorção tende a estabilizar em torno de 70 K, embora com maiores oscilações próximas à saturação devido à dificuldade de inserção das últimas moléculas e à possibilidade de estas atravessarem o material.

No caso em que os hidrogênios foram posicionados na bicamada abaixo e acima da superfície do grafidino, os resultados foram obtidos conforme as mesmas expressões da energia média de adsorção (Equação 2.5) e da estimativa da temperatura de dessorção pela relação de Van't Hoff (Equação 2.2).

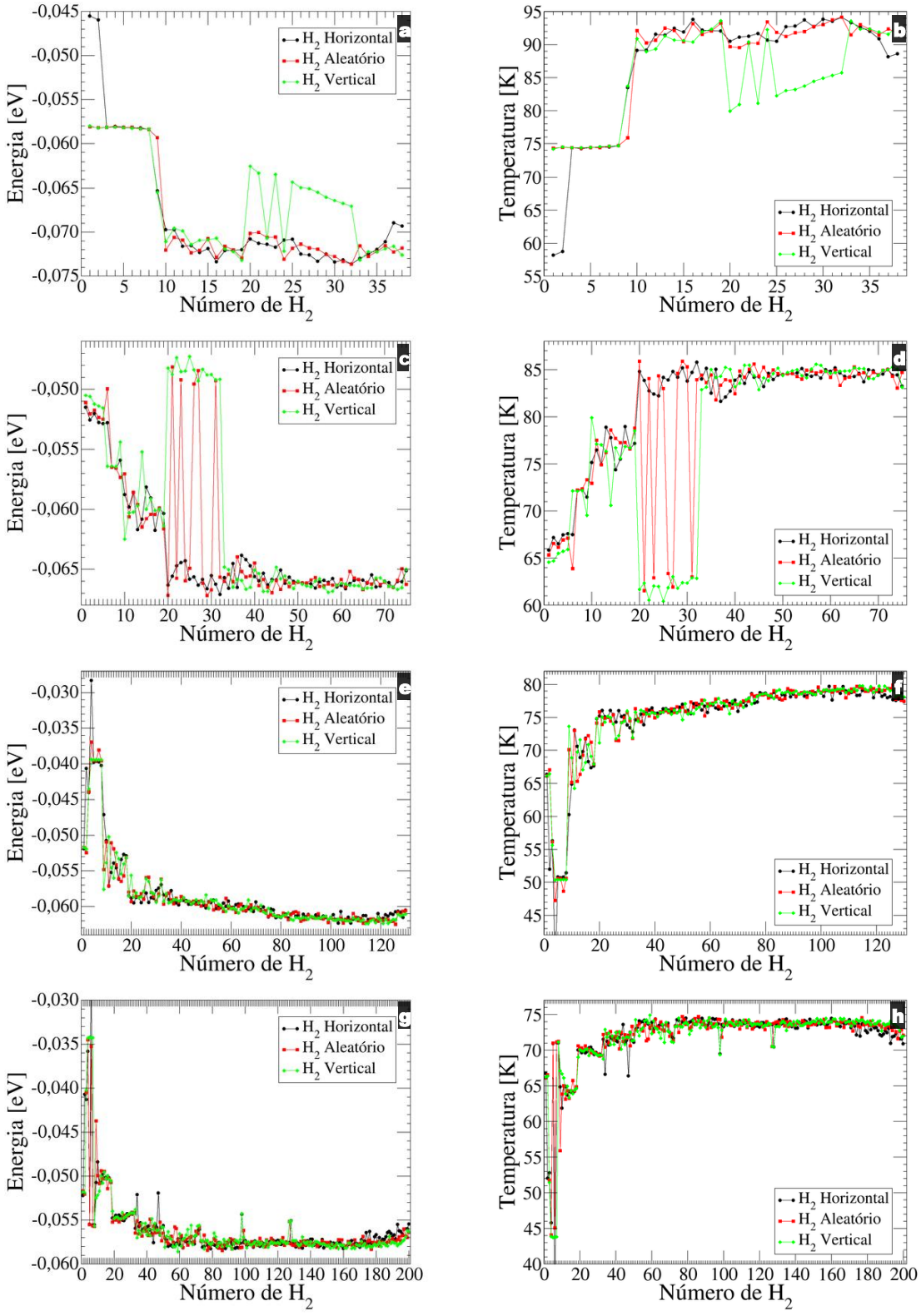
Para o γ-grafino (Figura 18a–b), a adsorção inicial apresenta energia de −0,057 eV por molécula de H_2, tornando-se progressivamente mais favorável com o aumento do número de moléculas, até convergir para um valor médio de aproximadamente −0,073 eV próximo à saturação. O perfil de temperatura de dessorção (Figura 18b) segue essa mesma tendência: inicia por volta de 75 K e atinge cerca de 93 K na saturação.

No γ-grafidino (Figura 18c–d), a energia média de adsorção inicia em −0,050 eV. Observam-se flutuações e diferenças marcantes entre 20 e 33 moléculas de H_2. No caso vertical, a energia é de aproximadamente −0,050 eV; no caso horizontal, em torno de

–0,065 eV; e no caso de aleatório, a energia oscila entre esses dois valores. Essas variações estão novamente associadas à presença de vacâncias de maior dimensão, nas quais as moléculas de H_2 tentam se acomodar. A energia converge para cerca de –0,067 eV próximo à saturação. O perfil de temperatura de dessorção começa em aproximadamente 65 K e, após a faixa instável (20–33 moléculas), estabiliza-se próximo de 85 K.

O γ-grafitrino (Figura 18e–f) apresenta uma energia de adsorção inicial de –0,053 eV, flutuando até –0,035 eV nas primeiras moléculas de H_2 adsorvidas, e tornando-se mais

Figura 18 – Perfis de energia de adsorção média e temperatura de dessorção com



bicamada de H_2 para estrutura: a) e b) γ-grafino; c) e d) γ-grafidino; e) e f) γ-grafitrino; g) e h) γ-grafiquatrino.

Fonte: Elaboração própria.

estável após a adsorção de 20 moléculas, convergindo para cerca de −0,058 eV. Nesta estrutura, a vacância mais ampla favorece maior liberdade de orientação das moléculas de H_2, resultando em variações energéticas menos acentuadas. A temperatura de dessorção associada converge para aproximadamente 78 K.

Por fim, o γ-grafiquatrino (Figura 18g–h) apresenta comportamento atípico entre 5 e 15 moléculas de H_2, devido à tentativa de acomodar mais de três moléculas na mesma vacância, o que induz interações repulsivas e instabilidade energética, especialmente com orientações horizontais ou aleatórias. A energia de adsorção converge para −0,058 eV próximo à saturação, enquanto a temperatura de dessorção tende a estabilizar-se em torno de 74 K. No caso da bicamada, observa-se um aumento consistente da temperatura de dessorção em todos os materiais em comparação com a monocamada. Além disso, ao realizar a otimização em algumas configurações, observa-se a passagem de moléculas de H_2 através das vacâncias durante o processo de otimização da estrutura.

Avaliação estrutural do γ-grafidino com decorante de metais alcalino

Após a obtenção dos resultados para os γ-grafinos considerando a interação com moléculas de hidrogênio, foi selecionado o γ-grafidino para o estudo da incorporação de um decorante. A escolha desta estrutura se deve ao fato de apresentar vacâncias do tipo V1 e V2, que, devido ao seu raio de van der Waals, oferecem um espaço suficientemente amplo para acomodar átomos de metais alcalinos como decorantes na superfície, conforme ilustrado nas Figura 7 e 12.

As combinações de decorantes nas vacâncias V1 e V2 foram analisadas com o objetivo de identificar configurações estruturalmente estáveis para o sistema γ-

grafidino+V1+V2. As energias de ligação foram calculadas utilizando a Equação 2.3, e os resultados estão apresentados na Tabela 5.

Devido à ausência de parâmetros para interações envolvendo lítio (Li) no conjunto *3OB* do *DFTB+*, que não possui parametrização com sódio (Na) e potássio (K), não foi possível estudar combinações como Na–Li ou K–Li. Adicionalmente, para a combinação Li+Li, a estrutura não se estabilizou, apresentando deformações e rupturas; por isso, tais configurações foram desconsideradas.

Tabela 4 – Energias de formação dos γ-grafidinos decorados com (K, Na, Li) Fonte: Elaboração propiá.

Estrutura	E_{form} 2x2 (eV)	Estrutura	E_{form} 2x2 (eV)
γ-grafidino+K	-7,697	γ-grafidino+K+K	-7,389
γ-grafidino+Na	-7,693	γ-grafidino+Na+Na	-7,399
γ-grafidino+Li	-7,694	γ-grafidino+Na+K	-7,399

Observa-se que, quando apenas a vacância V1 é ocupada, a energia de ligação é de aproximadamente –7,69 eV, indicando maior estabilidade. No entanto, quando ambas as vacâncias V1 e V2 são simultaneamente ocupadas, a energia de ligação aumenta para cerca de –7,39 eV, sugerindo uma redução relativa da estabilidade do sistema. Esse comportamento evidencia que a ocupação exclusiva da vacância V1 resulta em uma configuração energeticamente mais favorável.

Análise da adsorção e saturação de hidrogênio H_2 em superfícies de γ-grafidino com decorantes de metais alcalinos.

Para o sistema γ-grafidino funcionalizado com decorantes de metais alcalinos, realizou-se um estudo detalhado, dividido em três métodos: otimização simples, otimização em baixa temperatura e com dinâmica aplicando rampa de aquecimento.

Otimização simples

Nesse método, realizou-se uma otimização das estruturas com a mesma abordagem de adicionar moléculas de hidrogênio sequencialmente e, por fim, calcular a energia média de adsorção utilizando a equação 2.4 e a temperatura de dessorção pela equação 2.2. Os resultados estão apresentados na Figura 19.

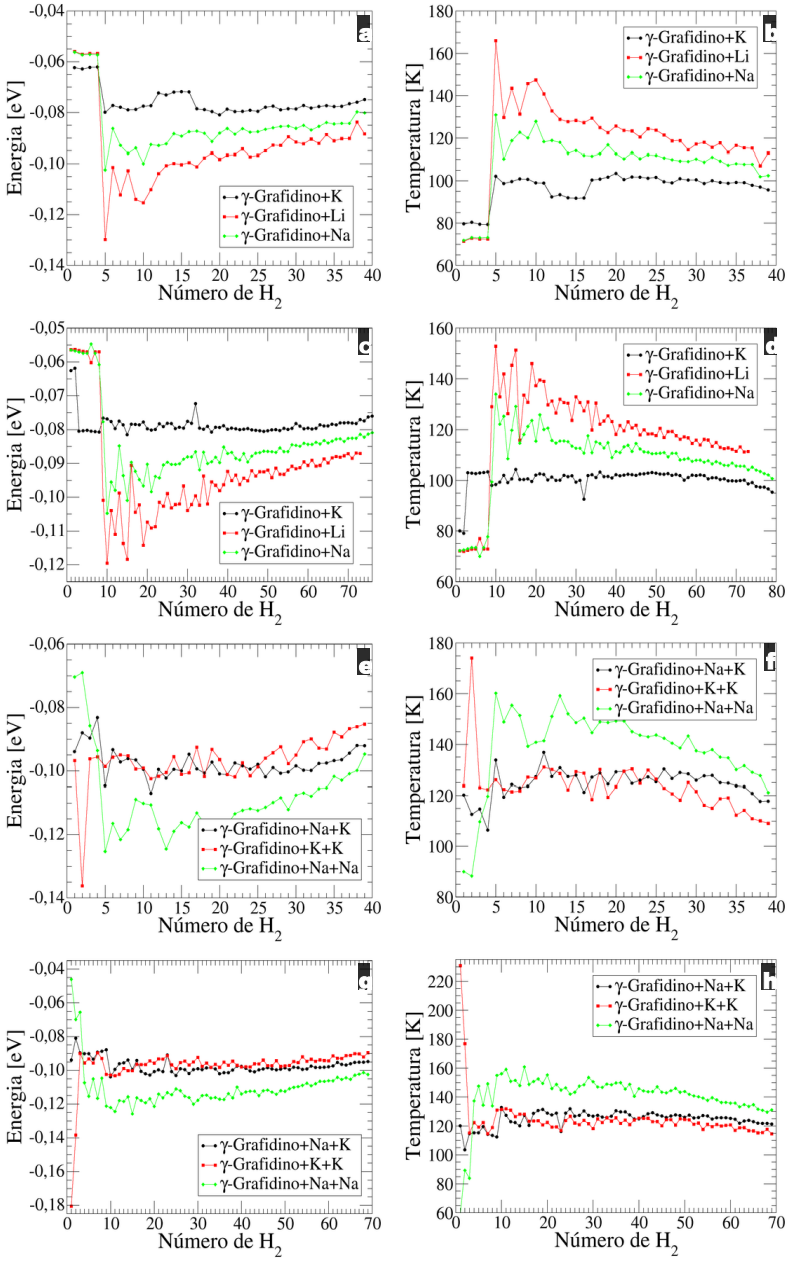
Ao analisar a adsorção em monocamada de moléculas de H_2 sobre o γ-grafidino decorado com V1 (K, Li e Na) (Figura 19a-b), observa-se que a energia de adsorção média apresenta valores iniciais em torno de −0,055 eV para Li e Na, enquanto para K o valor é de aproximadamente −0,077 eV nas primeiras moléculas de hidrogênio. Após a quinta molécula de H_2, ocorre uma variação abrupta: para K, a energia estabiliza-se entre

−0,080 eV e −0,085 eV; no caso do Li, parte de −0,13 eV e aproxima-se de −0,09 eV; para o Na, inicia em −0,09 eV e sobe gradualmente até cerca de −0,08 eV.

As temperaturas de dessorção seguem tendência semelhante. Para as primeiras moléculas de H_2, o valor é de cerca de 80 K para K e 70 K para Li e Na, seguido por um aumento abrupto. No caso do K, estabiliza-se entre 98 K e 100 K; para o Li, o aumento é mais acentuado, atingindo cerca de 170 K antes de decair gradualmente até aproximadamente 120 K; para o Na, a temperatura inicial de 130 K diminui continuamente até cerca de 116 K. Esse comportamento inicial, com energias e temperaturas relativamente baixas seguidas de variações bruscas, sugere que as moléculas de H_2 ocupam primeiramente vacâncias livres não decoradas, padrão também observado na ausência de decorantes (Figura 17c-d). Após a quinta molécula, a influência dos átomos decorantes torna-se mais evidente, elevando a energia e a temperatura de dessorção.

No caso da bicamada de H_2 (Figura 19c-d), para K a energia inicial é de aproximadamente −0,063 eV, com queda abrupta para cerca de −0,08 eV, permanecendo nesse patamar. Para Li e Na, a energia mantém-se até o nono hidrogênio em torno de −0,056 eV,

Figura 19 – Perfis da energia média de adsorção e da temperatura de dessorção, obtidos a partir das estruturas previamente otimizadas, para: a–b) monocamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1; c–d) bicamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1; e–f) monocamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1+V2; e g–h) bicamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1+V2.



Fonte: Elaboração própria.

seguida de queda abrupta: para Li, atinge −0,119 eV e converge próximo de −0,094 eV, observando-se saturação com menor número de H_2; para Na, cai para cerca de −0,105 eV e estabiliza próximo de −0,082 eV.

As temperaturas de dessorção na bicamada indicam que, para K, o valor inicial é de 80 K e estabiliza rapidamente (a partir da terceira molécula) em torno de 104 K, com pequenas flutuações. Para Li, parte de 70 K, sobe abruptamente para cerca de 150 K, com flutuações mais amplas, e decai até 120 K. Já para Na, a subida inicial atinge 130 K, seguida de oscilações e queda até cerca de 100 K.

Ao analisar a monocamada de H_2 sobre o γ-grafidino+V1+V2, considerando combinações de decorantes Na+K, K+K e Na+Na (Figura 19e-f), observa-se um comportamento distinto para cada configuração. Para Na+K, a energia de adsorção inicia-se em cerca de

−0,095 eV, com oscilações moderadas até convergir para aproximadamente −0,090 eV. No caso de K+K, parte de −0,098 eV, aumenta em magnitude até −0,138 eV e reduz gradualmente, estabilizando-se em torno de −0,095 eV. Para Na+Na, inicia em −0,070 eV, aumenta até −0,125 eV e reduz em módulo até cerca de −0,095 eV.

As temperaturas de dessorção acompanham essas tendências: para Na+K, inicia em 120 K e converge para 119 K; para K+K, parte de 125 K, sobe até 175 K e decai até 110 K; para Na+Na, começa em 90 K, eleva-se para 160 K e diminui até cerca de 120 K.

Na bicamada (Figura 19g-h), Na+K inicia com energia próxima de −0,090 eV e converge para −0,095 eV. O sistema K+K começa com −0,180 eV, sofre variação abrupta e estabiliza em torno de −0,095 eV. Para Na+Na, o valor inicial é de −0,055 eV, aumenta até −0,120 eV e depois reduz em módulo até cerca de −0,100 eV.

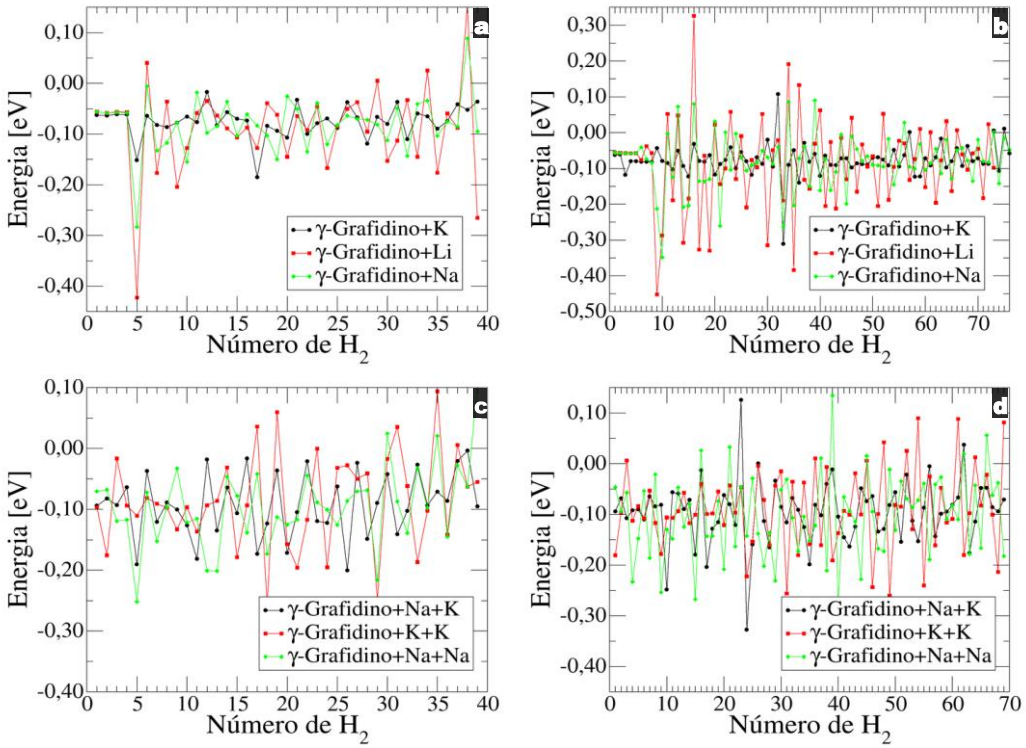
Em relação às temperaturas de dessorção da bicamada, Na+K inicia em 120 K, mantendo pequenas variações; K+K começa em 230 K, cai abruptamente para cerca de 120 K e estabiliza; Na+Na parte de 60 K, sobe até 140 K e estabiliza próximo de 130 K.

Energia de adsorção sequencial de H_2

Os resultados para a energia de adsorção sequencial sobre o γ-grafidino, definida como a energia necessária para adicionar a n-ésima molécula de H_2 (Equação 2.5), estão apresentados na Figura 20.

Este estudo considera tanto monocamadas quanto bicamadas. Observa-se que o perfil energético apresenta maior irregularidade, caracterizado por flutuações extremas, com a presença de poços de energia atingindo valores de até −0,45 eV e picos positivos superiores a +0,30 eV. Os valores positivos de energia indicam interações energeticamente desfavo-ráveis para a adição de H_2, especialmente no sistema dopado com lítio (γ-grafidino+Li). Isso evidencia a influência do tipo de dopante na estabilidade das moléculas adsorvidas.

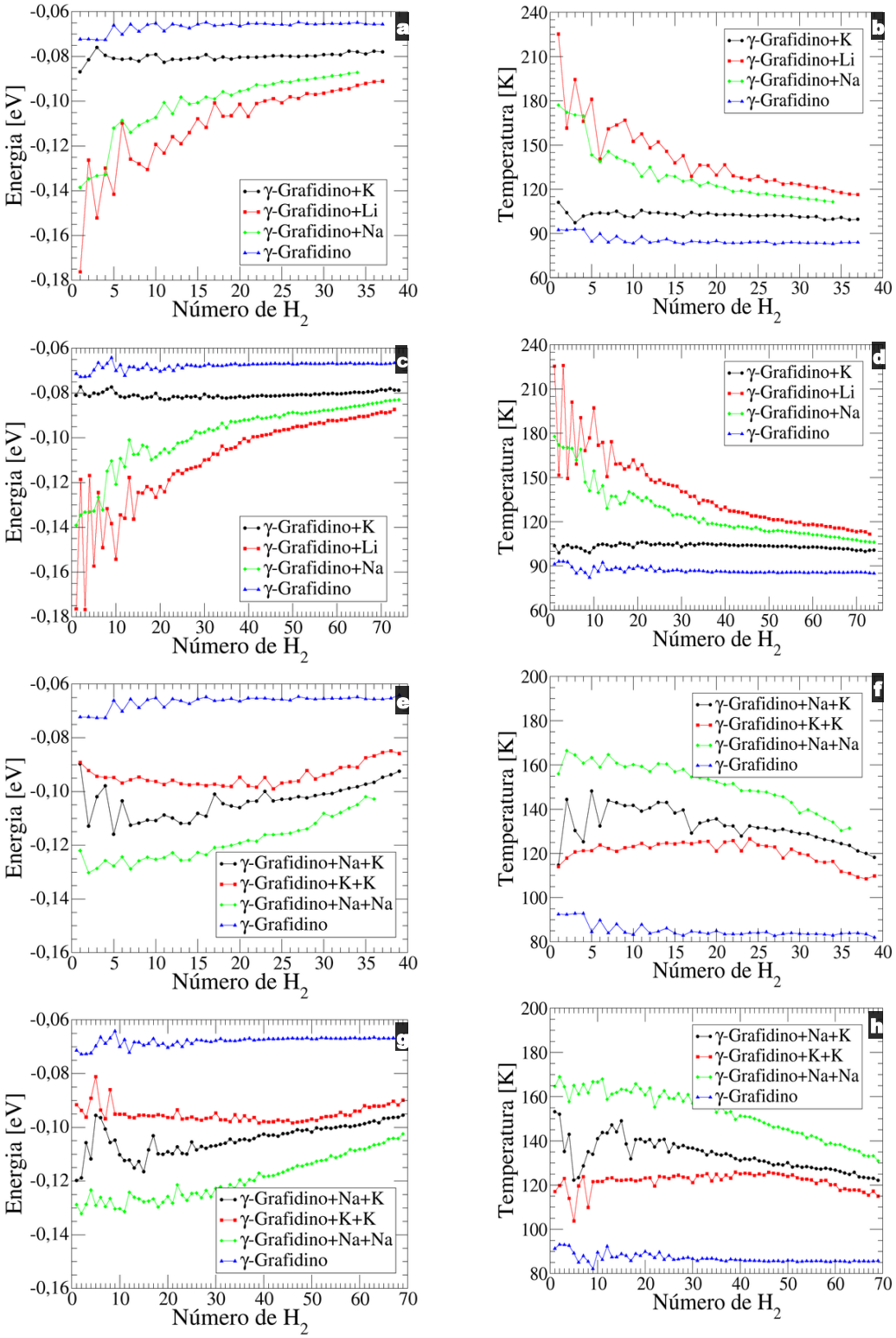
Figura 20 – Perfis de energia de adsorção consecutiva de H_2, obtidos a partir das estruturas previamente otimizadas, para monocamada e bicamada de H_2 sobre: a-b) γ-grafidino+V1; c-d) γ-grafidino+V1+V2.



Otimização após dinâmica em baixa temperatura

Neste método, reutiliza-se a otimização simples previamente realizada como ponto de partida, seguida de uma dinâmica molecular a 30 K. Após a dinâmica em baixa temperatura, realiza-se novamente a otimização e repete-se o cálculo da energia média de adsorção, utilizando a Equação 2.4, bem como a temperatura de dessorção, pela Equação 2.2, obtendo-se os resultados apresentados na Figura 21.
Ao analisar a adsorção em monocamada de moléculas de H_2 sobre o γ-grafidino decorado com V1 (K, Li e Na) e na ausência de decorantes (Figura 21a-b), observa-se que, para o decorante K, a energia média de adsorção inicia-se em aproximadamente −0,090 eV e mantém-se praticamente estável em torno de −0,080 eV ao longo da sequência de moléculas adsorvidas. Para o Li, o valor inicial é de cerca de −0,177 eV, apresentando oscilações nas primeiras moléculas e diminuindo gradualmente até convergir para −0,090 eV na saturação. No caso do Na, a energia inicial é de aproximadamente −0,140 eV, aumentando progressivamente até estabilizar-se em torno de −0,095 eV. Na ausência de decorantes, o valor mantém-se próximo de −0,070 eV, reduz ate cerca de −0,0750 eV e variações mínimas. As temperaturas de dessorção para a monocamada seguem tendências compatíveis com

Figura 21 – Perfis da energia média de adsorção e da temperatura de dessorção, obtidos a partir das estruturas otimizadas, após a aplicação de uma dinâmica em baixa temperatura, para: a–b) monocamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1; c–d) bicamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1; e–f) monocamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1+V2; e g–h) bicamada de H_2 sobre γ-grafidino+V1+V2.



Fonte: Elaboração própria.

as energias observadas. Para K, inicia-se em aproximadamente 110 K e estabiliza-se em 100 K. No caso do Li, parte de 230 K, com flutuações acentuadas nas primeiras moléculas, diminuindo gradualmente até cerca de 125 K. Para o Na, o valor inicial é de aproximadamente 180 K, reduzindo-se com pequenas oscilações até estabilizar-se em torno de 120 K. Sem decorantes, a temperatura inicial é de aproximadamente 90 K, estabilizando-se próxima de 83 K.

No caso da bicamada de H_2 (Figura 21c-d), para o decorante K a energia inicial é de aproximadamente −0,080 eV, mantendo-se estável nesse valor. Para o Li, inicia em cerca de w−0,180 eV, com flutuações acentuadas nas primeiras moléculas, seguido de aumento gradual após a adsorção da 15ª molécula, convergindo para aproximadamente −0,087 eV. No caso do Na, começa em torno de −0,140 eV e aumenta, com flutuações moderadas, até convergir próximo de −0,085 eV. Sem decorantes, a energia inicial é de aproximadamente

−0,070 eV, com pequenas variações até convergir para cerca de −0,067 eV. As temperaturas de dessorção da bicamada mostram, para K, valor inicial de aproximadamente 100 K, mantendo-se estável ao longo de todo o processo. Para o Li, inicia em cerca de 225 K, com flutuações iniciais elevadas e subsequente redução até estabilizar-se em torno de 115 K. Para o Na, começa em aproximadamente 175 K, diminuindo gradualmente até cerca de 110 K, com flutuações moderadas.

É evidente que, quando a estrutura possui um número menor de moléculas de H_2, a temperatura de dessorção aumenta. À medida que se aumenta a quantidade de H_2, a temperatura de dessorção diminui. Este comportamento ocorre apenas quando há um decorante de Na e Li (Figura 21b-d).

Ao analisar a monocamada de H_2 sobre o γ-grafidino+V1+V2, considerando as combinações de decorantes Na+K, K+K e Na+Na (Figura 21e-f), observa-se comportamento distinto em cada caso. Para Na+K, a energia de adsorção inicia-se em cerca de −0,090 eV, diminuindo nos primeiros H_2 com oscilações até atingir o mínimo de −0,115 eV; após a sexta molécula de H_2, aumenta gradualmente até −0,093 eV. No caso de

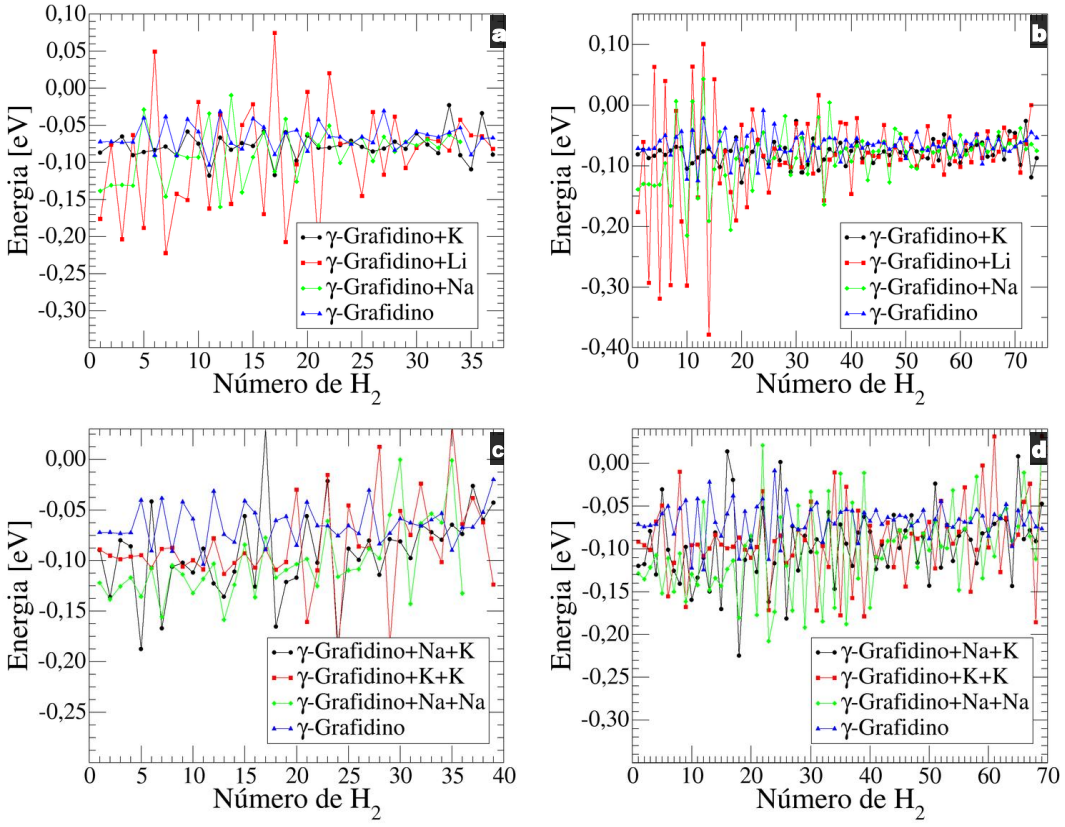
K+K, parte de −0,090 eV, reduz-se ligeiramente até um mínimo de −0,100 eV e volta a aumentar até
−0,085 eV, quase sem oscilações. Para Na+Na, inicia em −0,125 eV, atinge o mínimo de
−0,130 eV e aumenta gradualmente até cerca de −0,100 eV. As temperaturas de dessorção seguem tendências específicas: para Na+K, iniciam em 115 K, atingem um máximo de 150 K e diminuem gradualmente para 120 K; para K+K, começam em 115 K, alcançam 125 K e reduzem-se até 110 K; para Na+Na, iniciam em 160 K e decrescem até cerca de 130 K.

Na bicamada (Figura 21g-h), Na+K inicia com energia próxima de −0,120 eV, aumentando até −0,095 eV, diminuindo depois até próximo do valor inicial e voltando a crescer gradualmente até −0,095 eV. O sistema K+K começa com −0,092 eV, sofre pequenas variações iniciais, estabiliza e aumenta até −0,090 eV. Para Na+Na, o valor
inicial é de −0,130 eV, aumentando gradualmente até cerca de −0,102 eV. As temperaturas de dessorção seguem tendências específicas: para Na+K, inicia em 150 K, atinge um mínimo de 125 K e decresce para 120 K; para K+K, começa em 118 K, alcança 125 K e reduz-se para 110 K; para Na+Na, inicia em 160 K e diminui até cerca de 130 K. Esse comportamento se mantém com o aumento do número de moléculas de H_2, de modo que a temperatura de dessorção se mantém constante ou diminui proporcionalmente ao número de moléculas de H_2 adsorvidas.

Energia de adsorção sequencial de H_2

A simulação de dinâmica molecular de baixa temperatura melhora a otimização calculando a energia de adsorçao sequencial se hizo o resultados que estão na Figura 22.

Figura 22 – Perfis de energia de adsorção consecutiva de H_2, obtidos a partir das estruturas otimizadas, após a aplicação de uma dinâmica em baixa temperatura, para monocamada e bicamada de H_2 sobre: a-b) γ-grafidino+V1; c-d) γ-grafidino+V1+V2.



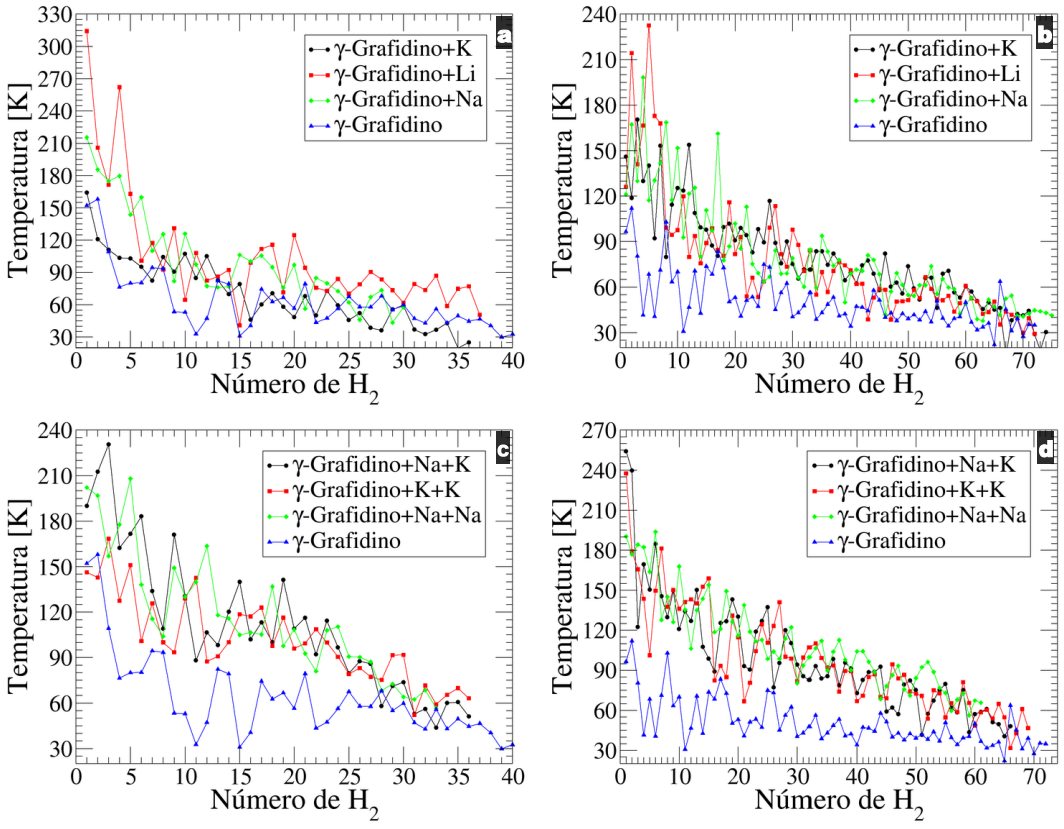
Este estudo considera tanto monocamadas quanto bicamadas. Observa-se que o perfil energético de adsorção consecutiva permaneceu consistentemente negativo, variando aproximadamente entre -0,05 e -0,25 eV, o que indica que a adsorção consecutiva de H_2 é energeticamente favorável após a otimização. Observa-se que o γ-grafidino puro apresenta valores de energia de adsorção menos negativos, refletindo uma interação

mais fraca com as moléculas de hidrogênio. Por outro lado, a dopagem com metais alcalinos (Na, Li e K) aumenta significativamente a capacidade de adsorção, resultando

em energias mais negativas. Em particular, o sistema funcionalizado com sódio e potássio (γ-grafidino+Na+K) apresentou, em média, as energias de adsorção mais favoráveis, indicando maior estabilidade e potencial para o armazenamento eficiente de moléculas de H_2.

A redução das flutuações observadas nas curvas de temperatura e energia, quando comparadas ao método anterior, pode ser atribuída ao efeito da dinâmica molecular em baixa temperatura, que possibilita uma reorganização mais eficiente das posições das moléculas de H_2 durante a adsorção. Esse rearranjo estrutural tende a produzir perfis de energia e temperatura mais suaves, refletindo um processo de acomodação mais estável das moléculas na superfície.

Figura 23 – Perfis de temperatura de dessorção obtidos por meio de simulações de dinâmica molecular com rampa de aquecimento para o γ-grafidino puro e decorado nas seguintes configurações: a) vacância V1 com monocamada de H_2; b) vacância V1



com bicamada de H_2; c) vacâncias V1+V2 com monocamada de H_2; d) vacâncias V1+V2 com bicamada de H_2.
Fonte: Elaboração própria.

Dinâmica com rampa de aquecimento

Neste método, os resultados obtidos na otimização estrutural foram utilizados como configuração inicial para a realização da dinâmica molecular com uma rampa de aquecimento, permitindo determinar diretamente a temperatura de dessorção. Foram considerados os parâmetros descritos na Seção 3.6. Os valores obtidos para a temperatura de dessorção estão apresentados na Figura 23.
Ao analisar a temperatura de dessorção das monocamadas de moléculas de H_2 sobre o γ-grafidino decorado com V1 (K, Li e Na) e na ausência de decorantes (Figura 23a), observa-se que, para o K, o valor inicial é de aproximadamente 160 K, diminuindo com flutuações moderadas até cerca de 20 K. Para o Li, inicia em torno de 320 K, apresentando oscilações e redução gradual até aproximadamente 20 K. No caso do Na, começa em 220 K e decresce até em torno de 50 K. Na ausência de decorantes, o valor inicial é de cerca de 150 K, reduzindo gradualmente até aproximadamente 30 K.
No caso das bicamadas (Figura 23b), para o K, o valor inicial é de aproximadamente 150 K, diminuindo com oscilações moderadas até cerca de 30 K. Para o Li, inicia em torno de 135 K, apresentando oscilações de alta amplitude que atingem até 225 K nas primeiras moléculas de H_2, reduzindo posteriormente até cerca de 35 K. Para o Na, o valor inicial é de 120 K, oscilando até aproximadamente 195 K nas primeiras moléculas e diminuindo as oscilações até estabilizar em torno de 45 K. Na ausência de decorantes, inicia em 100 K, com oscilações moderadas, reduzindo gradualmente até aproximadamente 30 K.
Para a monocamada com dupla decoração (Figura 23d), observa-se que, para Na+K, o valor inicial é de aproximadamente 190 K, diminuindo com oscilações moderadas

até cerca de 50 K. No caso de K+K, inicia em torno de 150 K, oscilando e reduzindo até aproximadamente 65 K. Para Na+Na, o valor inicial é de 215 K, diminuindo com oscilações até cerca de 60 K.

Por fim, ao analisar a bicamada de H_2 sobre o γ-grafidino+V1+V2, considerando combinações de decorantes Na+K, K+K e Na+Na (Figura 23c), observa-se que, para Na+K, o valor inicial é de aproximadamente 255 K, reduzindo com oscilações moderadas até cerca de 50 K. Para K+K, inicia em torno de 235 K, flutuando e diminuindo até aproximadamente 45 K. No caso de Na+Na, começa em 220 K e decresce gradualmente até cerca de 50 K.

Comparação dos pesos gravimétricos e das temperaturas de dessorção

Nesta seção, são comparados os resultados obtidos para os γ-grafidinos estudados, considerando os diferentes métodos aplicados. Além disso, realiza-se a análise dos perfis de temperatura para cada estrutura, permitindo avaliar as diferenças de comportamento entre os métodos.

Peso gravimétrico

Os resultados do peso gravimétrico podem ser organizados em monocamada e bicamada, conforme apresentado na Tabela 5. Observa-se, em todos os casos analisados, uma redução do peso gravimétrico em relação aos valores obtidos apenas na otimização estrutural, após a aplicação da dinâmica molecular em baixa temperatura.

Quando se aplica a dinâmica molecular com rampa de aquecimento, a maioria dos sistemas apresenta diminuição adicional do peso gravimétrico, tanto para monocamada quanto para bicamada, refletindo um comportamento mais realista do processo de adsor-ção. Nesses casos, o peso gravimétrico final tende a ser menor que nos outros métodos, impactando também os perfis de temperatura de dessorção. Esse efeito pode ser atribuído à redução da interação de van der Waals,

uma vez que a dinâmica molecular evidencia a influência das moléculas de H_2 vizinhas, promovendo uma reorganização mais eficiente e compacta das moléculas sobre a superfície decorada.

Sistemas com decorantes mais leves ou combinados, como Li ou Na+Na, apresentam reduções mais significativas do peso gravimétrico, indicando maior reorganização das moléculas de H_2. Para as bicamadas, embora os valores absolutos do peso gravimétrico sejam aproximadamente o dobro dos da monocamada, as tendências de redução após a dinâmica permanecem semelhantes, confirmando que a rampa de aquecimento favorece a acomodação mais eficiente das moléculas adsorvidas.

Tabela 5 – Peso gravimétrico das estruturas com a saturação máxima de H_2.

	Otimização simples %wt	**Após dinâmica %wt**	**Dinâmica com rampa %wt**
Monocamada			
γ-grafidino	8,475	7,889	8,475
γ-grafidino+K	7,544	7,185	7,004
γ-grafidino+Na	7,101	6,248	6,762
γ-grafidino+Li	8,043	7,662	6,304
γ-grafidino+Na+K	6,553	6,553	6,079
γ-grafidino+K+K	6,928	6,928	6,429
γ-grafidino+Na+Na	6,216	5,766	5,311
Bicamada			
γ-grafidino	14,793	14,625	14,286
γ-grafidino+K	14,184	13,406	13,406
γ-grafidino+Na	13,408	12,667	12,816
γ-grafidino+Li	14,069	14,069	13,903
γ-grafidino+Na+K	11,037	11,037	10,608
γ-grafidino+K+K	11,637	11,637	11,637
γ-grafidino+Na+Na	10,496	10,496	9,933

Fonte: Elaboração propiá.

O potássio (K) apresenta desempenho superior ao sódio (Na) em relação ao peso gravimétrico devido a características estruturais e eletrônicas. Ambos pertencem à mesma família dos metais alcalinos, possuindo comportamento químico semelhante. No entanto, o potássio, por apresentar maior raio atômico e menor energia de

ionização, forma ligações mais fracas e polarizáveis com a superfície do material decorado, favorecendo uma melhor interação com o substrato.

No caso da estrutura γ-grafidino+V1, observa-se que o K proporciona uma distribuição mais estável e maior capacidade de adsorção de hidrogênio, resultando em melhor desempenho gravimétrico. Já nas combinações γ-grafidino+V1+V2, o potássio também se destaca em comparação ao sódio, indicando maior eficiência de armazenamento. Esses resultados podem ser confirmados pelos valores apresentados na Tabela 5.

Portanto, mesmo pertencendo à mesma família de metais alcalinos, o potássio se mostra o decorante mais eficiente em termos de desempenho gravimétrico, superando o Na e o Li.

Comparação dos perfis de temperatura.

Para complementar a análise, é relevante comparar os perfis de temperatura obtidos pelos diferentes métodos, pois essa comparação permite avaliar como a dinâmica molecular em baixa temperatura influencia a otimização e o cálculo da temperatura, bem como o efeito da dinâmica com rampa de aquecimento sobre a temperatura de dessorção das moléculas de H_2. Essa abordagem proporciona uma visão integrada do comportamento geral dos sistemas sob distintos decorantes, conforme ilustrado nas Figura 24-25.

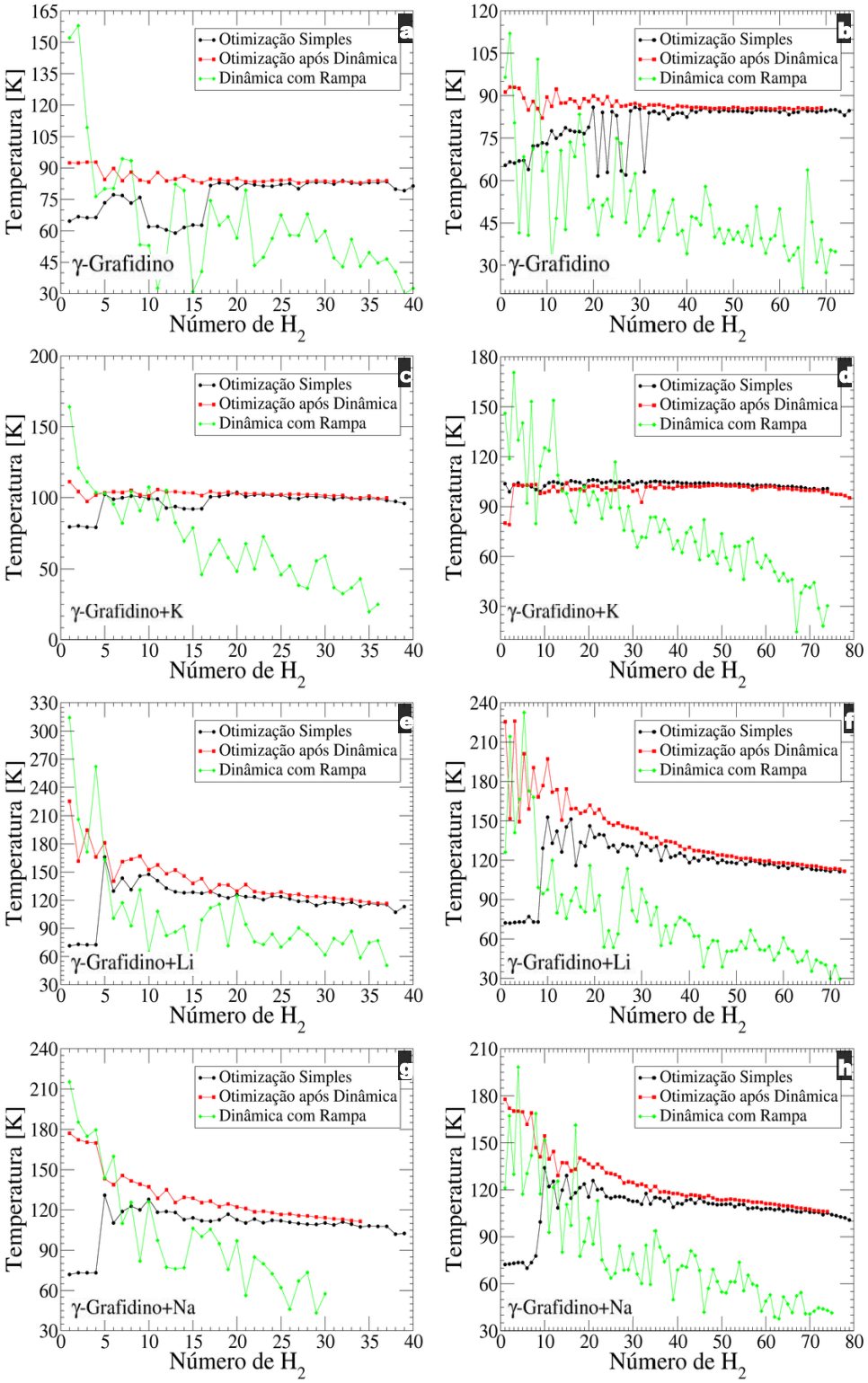
No caso de γ-grafidino, observa-se que os métodos de otimização simples e de otimização dinâmica apresentam diferenças significativas nos primeiros quinze hidrogênios. A dinâmica com rampa iniciando a alta temperatura apresenta uma pequena faixa em que os três métodos coincidem; posteriormente, a temperatura tende a ser subestimada, acompanhada de uma oscilação decrescente. Esse comportamento é evidente tanto na monocamada de H_2 (Figura 24a) quanto na bicamada, onde os métodos de otimização simples e após dinâmica exibem comportamento similar, embora haja instabilidade na faixa de 20-35 hidrogênios. Já

a dinâmica molecular com rampa de aquecimento inicia com oscilações amplas que decrescem progressivamente em magnitude e temperatura (Figura 24b).

Para γ-grafidino+K, os métodos de otimização simples e otimização dinâmica apresentam pequenas diferenças, enquanto a dinâmica com rampa mostra coincidência na faixa de 5-15 H_2 seguida de uma subestimação da temperatura e oscilação decrescente. Esse comportamento é consistente tanto na monocamada (Figura 24c) quanto na bicamada (Figura 24d).

Para a estrutura γ-grafidino+Na, observa-se que os três métodos apresentam

Figura 24 – Comparação entre diferentes métodos para o cálculo das temperaturas de dessorção em monocamada e bicamada para as seguintes estruturas a-b) γ-grafidino; c-d) γ-grafidino+K; e-f) γ-grafidino+Na; g-h) γ-grafidino+Li.



Fonte: Elaboração própria.

comportamento bastante similar, destacando-se apenas a dinâmica com rampa, que resulta em uma subestimação da temperatura. Esse padrão é consistente tanto na monocamada (Figura 24e) quanto na bicamada, sendo perceptível apenas uma diferença inicial no método de otimização simples (Figura 24f).

Já para o γ-grafidino+Li, as discrepâncias são ligeiramente mais evidentes entre os métodos de otimização simples e após dinâmica, sobretudo na faixa correspondente aos primeiros cinco H_2. Nesse caso, a dinâmica com rampa também conduz a uma leve subestimação da temperatura. Tal comportamento se mantém tanto na monocamada (Figura 24g) quanto na bicamada (Figura 24h).

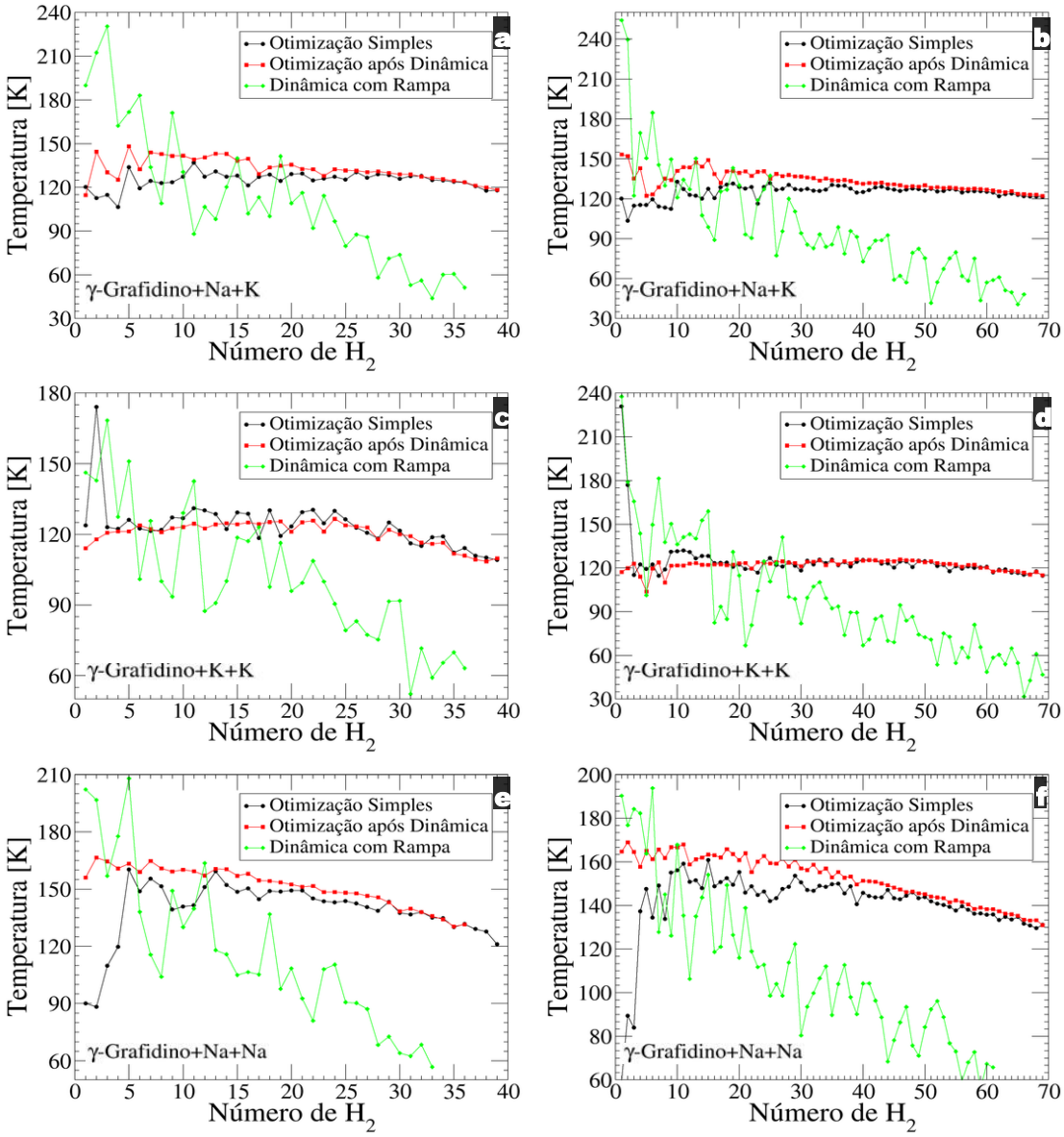
Para a estrutura γ-grafidino+Na+K, os métodos de otimização simples e após dinâmica apresentam diferenças sutis, enquanto a dinâmica com rampa de aquecimento tende a superestimar a temperatura inicial. Na faixa intermediária, observa-se concordância entre os métodos, seguida por uma subestimação da temperatura e oscilações de magnitude decrescente. Esse comportamento é consistente tanto para a monocamada (Figura 25a) quanto para a bicamada (Figura 25b).

Para γ-grafidino+K+K, os métodos de otimização exibem comportamento praticamente idêntico, destacando-se apenas a dinâmica com rampa, que resulta em uma subestimação sistemática da temperatura ao longo de todo o intervalo analisado. Essa ten-dência é observada tanto na monocamada (Figura 24c) quanto na bicamada (Figura 25d).

No caso da estrutura γ-grafidino+Na+Na, as discrepâncias entre os métodos são mais pronunciadas, especialmente entre a otimização simples e após dinâmica, nas regiões correspondentes à adsorção dos primeiros quatro átomos de H_2. A dinâmica com rampa, por sua vez, também apresenta uma leve subestimação da temperatura. Para a bicamada, as diferenças entre os métodos de otimização se estendem até aproximadamente 15 moléculas de H_2, mantendo-se, contudo, a tendência de

subestimação da temperatura pelo método com rampa de aquecimento (Figura 25e–f).

Figura 25 – Comparação entre diferentes métodos para o cálculo das temperaturas de dessorção em monocamada e bicamada para as seguintes estruturas a-b) γ-grafidino+Na+K; c-d) γ-grafidino+K+K; e-f) γ-grafidino+Na+Na.



Fonte: Elaboração própria.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

As estruturas baseadas nos diferentes tipos de γ-grafinos investigadas neste trabalho demonstraram boa estabilidade após as otimizações estruturais realizadas por meio de simulações computacionais. Dentre elas, o γ-grafidino destacou-se como a estrutura mais promissora para a incorporação de metais alcalinos (Li, Na, K) como átomos decorantes, mantendo sua integridade estrutural mesmo após a funcionalização.

Os valores de capacidade gravimétrica calculados para os sistemas decorados superaram a meta mínima de 5,5 wt% estabelecida pelo Departamento de Energia dos Estados Unidos (DOE) para aplicações práticas em tecnologias de armazenamento de hidrogênio, evidenciando o potencial dessas estruturas para uso em dispositivos de energia limpa.

Além disso, os resultados obtidos para a temperatura de dessorção indicaram um aumento significativo devido à presença dos metais alcalinos. O sistema funcionalizado com lítio (Li) apresentou um incremento médio de aproximadamente 40 K, enquanto a configuração contendo dois átomos de potássio (K+K) resultou no maior aumento observado, atingindo cerca de 60 K, o que pode favorecer a retenção de hidrogênio em condições mais elevadas de operação.

A orientação da molécula de H_2 não apresentou influência significativa no processo de adsorção nos diferentes sistemas baseados em grafinos analisados neste trabalho.

A aplicação de simulações de dinâmica molecular em baixas temperaturas demonstrou ser uma ferramenta eficaz para a otimização estrutural, proporcionando estabilidade adicional aos sistemas investigados.

Os valores de capacidade gravimétrica indicaram uma redução no armazenamento máximo de hidrogênio em decorrência da presença dos átomos decorantes. No entanto, observou-se um aumento nas temperaturas finais de dessorção, o que pode favorecer a utilização prática dos materiais em condições mais exigentes.

Adicionalmente, os resultados obtidos por dinâmica molecular indicaram que a equação de Van't Hoff tende a superestimar a temperatura média de dessorção. Essa discrepância implica que a capacidade de armazenamento prevista pelas simulações de dinâmica molecular é inferior à estimativa fornecida pela equação semiempírica, ressaltando a importância de abordagens dinâmicas para uma avaliação mais realista do processo de adsorção de hidrogênio.

Com base nos resultados obtidos, algumas direções podem ser sugeridas para trabalhos futuros, visando ampliar e aprofundar as análises realizadas neste estudo:

- Realizar simulações de dinâmica molecular com maior tempo total, a fim de permitir uma análise mais detalhada da estabilidade térmica e do processo de dessorção das moléculas adsorvidas.
- Estudar a estrutura eletrônica da saturação de H_2 sobre o γ-grafidino puro e decorado, visando compreender em maior profundidade os mecanismos de adsorção e identificar possíveis estratégias de otimização.
- Investigar a adsorção de outras moléculas sobre as estruturas analisadas, avaliando os impactos na densidade eletrônica e o comportamento do material em diferentes cenários, de forma a ampliar seu potencial para aplicações tecnológicas diversas.

Referencias Bibliograficas

1 Gregory Clark and David Jacks. Coal and the industrial revolution, 1700–1869. European review of economic history, 11(1):39–72, 2007.

2 W Walker Hanlon. Coal smoke, city growth, and the costs of the industrial revolution. The Economic Journal, 130(626):462–488, 2020.

3 Giovanni Nicoletti, Natale Arcuri, Gerardo Nicoletti, and Roberto

Bruno. A technical and environmental comparison between hydrogen and some fossil fuels. Energy Conversion and Management, 89(1):205–213, 2015.

4 Caineng Zou, Qun Zhao, Guosheng Zhang, and Bo Xiong. Energy revolution: From a fossil energy era to a new energy era. Natural Gas Industry B, 3(1):1–11, 2016.

5 Roberta Quadrelli and Sierra Peterson. The energy–climate challenge: Recent trends in co2 emissions from fuel combustion. Energy polic, 35(11):5938–5952, 2007.

6 Patrick Moriarty and Damon Honnery. What is the global potential for renewable energy? Renewable and Sustainable Energy Reviews, 16(1):244–252, 2012.

7 Adnan Midilli, Ibrahim Dincer, and Murat Ay. Green energy strategies for sustainable development. Energy policy, 34(18):3623–3633, 2006.

8 Marc A Rosen and Seama Koohi-Fayegh. The prospects for hydrogen as an energy carrier: an overview of hydrogen energy and hydrogen energy systems. Energy, Ecology and Environment, 1:10–29, 2016.

9 Abdeen Mustafa Omer. Green energies and the environment. Renewable and sustainable energy reviews, 12(7):1789–1821, 2008.

10 Ibrahim Dincer. Renewable energy and sustainable development: a crucial review. Renewable and sustainable energy reviews, 4(2):157–175, 2000.

11 N.L. Panwar, S.C. Kaushik, and Surendra Kothari. Role of renewable energy sources in environmental protection: A review. Renewable

and Sustainable Energy Reviews, 15(3):1513–1524, 2011.

12 William Lee Jolly. Hydrogen. Encyclopedia Britannica, May 2024. Accessed 18 June 2024.

13 Nicola Armaroli and Vincenzo Balzani. The hydrogen issue. ChemSusChem, 4(1):21–36, 2011.

14 Andreas Züttel. Hydrogen storage methods. Naturwissenschaften, 91:157–172, 2004.

15 Muhammad Aziz. Liquid hydrogen: A review on liquefaction, storage, transportation, and safety. Energies, 14(18):5917, 2021.

16 Joakim Andersson and Stefan Grönkvist. Large-scale storage of hydrogen. International journal of hydrogen energy, 44(23):11901–11919, 2019.

17 Ulrich Eberle, Michael Felderhoff, and Ferdi Schueth. Chemical and physical solutions for hydrogen storage. Angewandte Chemie International Edition, 48(36):6608–6630, 2009.

18 I.P. Jain. Hydrogen the fuel for 21st century. International Journal of Hydrogen Energy, 34(17):7368–7378, 2009. IWBT 2008.

19 Saba Niaz, Taniya Manzoor, and Altaf Hussain Pandith. Hydrogen storage: Materials, methods and perspectives. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 50:457–469, 2015.

20 K. Ohira. 3 - slush hydrogen production, storage, and transportation. In Ram B. Gupta, Angelo Basile, and T. Nejat Veziroğlu, editors, Compendium of Hydrogen Energy, Woodhead Publishing Series in Energy, pages 53–90. Woodhead Publishing, 2016.

21 K.E. Lamb and C.J. Webb. A quantitative review of slurries for

hydrogen storage – slush hydrogen, and metal and chemical hydrides in carrier liquids. Journal of Alloys and Compounds, 906:164235, 2022.

22 J.O. Abe, A.P.I. Popoola, E. Ajenifuja, and O.M. Popoola. Hydrogen energy, economy and storage: Review and recommendation. International Journal of Hydrogen Energy, 44(29):15072–15086, 2019.

23 Mark D Allendorf, Vitalie Stavila, Jonathan L Snider, Matthew Witman, Mark E Bowden, Kriston Brooks, Ba L Tran, and Tom Autrey. Challenges to developing materials for the transport and storage of hydrogen. Nature Chemistry, 14(11):1214–1223, 2022.

24 Jason Graetz. New approaches to hydrogen storage. Chemical Society Reviews, 38(1):73–82, 2009.

25 Hazel Reardon, James M. Hanlon, Robert W. Hughes, Agata Godula-Jopek, Tapas K. Mandal, and Duncan H. Gregory. Emerging concepts in solid-state hydrogen storage: the role of nanomaterials design. Energy Environ. Sci., 5:5951–5979, 2012.

26 Tapas K. Mandal and Duncan H. Gregory. Hydrogen storage materials: present scenarios and future directions. Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. A: Inorg. Chem., 105:21–54, 2009.

27 Gábor Papp, Jenő Csorba, Gábor Laurenczy, and Ferenc Joó. A charge/discharge device for chemical hydrogen storage and generation. Angewandte Chemie, 123(44):10617–10619, 2011.

28 Jianwei Ren, Nicholas M. Musyoka, Henrietta W. Langmi, Mkhulu Mathe, and Shijun Liao. Current research trends and perspectives on materials-based hydrogen storage solutions: A critical review. International Journal of Hydrogen Energy, 42(1):289–311, 2017.

29 Charles W Hamilton, R Tom Baker, Anne Staubitz, and Ian Manners. B–n compounds for chemical hydrogen storage. Chemical Society Reviews, 38(1):279–293, 2009.

30 R.F.W. Bader and R.F. Bader. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. International series of monographs on chemistry. Clarendon Press, 1990.

31 Roberto Rivelino de Melo Moreno and Leonardo Sena Gomes Teixeira. Entendendo estrutura molecular com a molécula de hidrogênio ionizada. Química Nova, 22:882–888, 1999.

32 Marcelo H Herbst and Antônio RM Monteiro Filho. Um outro olhar sobre as ligações hidrogênio. Química Nova na Escola, 41(1):10–16, 2019.

33 H Ehrenreich. solid state: A new exposition solid state physics. Science, 197(4305):753–753, 1997.

34 Paulo Jorge Baeta Mendes. Complexos de hidrogénio com oxigénio (ou azoto) em metais, estudados por correlações angulares perturbadas. Universidade de Coimbra (Portugal), 1987.

35 Kaneez Fatima, Amir Mahmood Soomro, Muhammad Rafique, and Mahesh Kumar. Hydrogen storage on flat land materials, opportunities, and challenges: a review study. Journal of the Chinese Chemical Society, 69(4):663–680, 2022.

36 VA Tatarenko. Interaction of interstitial hydrogen atoms within hcp metals and distribution of diffuse radiation-scattering intensity in reciprocal space. International journal of hydrogen energy, 26(5):469–475, 2001.

37 Mark Sakitt, TB Day, RG Glasser, N Seeman, J Friedman, WE

Humphrey, and RR Ross. Low-energy k–meson interactions in hydrogen. Physical Review, 139(3B):B719, 1965.

38 JI de Moura. The dynamics of hydrogen atoms dissolved in zr cr 2 alloy. Physical Review, 1992.

39 Paul ES Wormer and Ad van der Avoird. Intermolecular potentials, internal motions, and spectra of van der waals and hydrogen-bonded complexes. Chemical reviews, 100(11):4109–4144, 2000.

40 Stepan S Batsanov. Van der waals radii of elements. Inorganic materials, 37(9):871–885, 2001.

41 Prapti Rahayu and Witri Wahyu Lestari. Study of synthesis and characterization of metal-organic frameworks mof-5 as hydrogen storage material. ALCHEMY Jurnal Penelitian Kimia, 12(1):14–26, 2016.

42 Olga A Stasyuk, Alexander A Voityuk, M Solà, and Anton J Stasyuk. γ-graphynes with extended polyyne chains for efficient photoinduced electron transfer in complexes with fullerenes. Carbon, 215:118460, 2023.

43 Lucas Martins Machado et al. Avanços na aplicação de câmaras de dessorção para remoção e recuperação dos gases metano e sulfeto de hidrogênio dissolvidos em efluente de reator uasb no tratamento de esgoto doméstico. ,, 2018.

44 Tian Ma, Haohao Wang, Jirui Du, Min Pu, Yanhui Tang, Zuoyin Yang, and Ming Lei. Hydrogen storage performance of a new two-dimensional b4n4 monolayer decorated with li atoms: A density functional theory study. International Journal of Hydrogen Energy, 60:1383–1391, 2024.

45 Brahamananda Chakraborty, Pranoy Ray, Nandini Garg, and Srikumar Banerjee. High capacity reversible hydrogen storage in titanium doped 2d carbon allotrope ψ-graphene: Density functional theory investigations. International Journal of Hydrogen Energy, 46(5):4154–4167, 2021.

46 Omar Faye and Jerzy A Szpunar. An efficient way to suppress the competition between adsorption of h2 and desorption of n h2–nb complex from graphene sheet: A promising approach to h2 storage. The Journal of Physical Chemistry C, 122(50):28506–28517, 2018.

47 Mojdeh Golzani, Azadeh Tadjarodi, Mozhgan Golzani, Mohammad Poliki, Rouholah Zare-Dorabei, and Kheibar Dashtian. γ-graphyne-based coordination, composite, and hybrid materials: Synthesis, characterizations, and advanced applications. Coordination Chemistry Reviews, 510:215838, 2024.

48 Saran Lamichhane, Nurapati Pantha, Bipin Khatry, Prakash Parajuli, and Narayan Prasad Adhikari. Hydrogen storage on multiple palladium-decorated graphene. International Journal of Modern Physics B, 35(28):2150290, 2021.

49 Gonzalo Contreras Guijarro. Análisis de la sensibilidad del método gravimétrico aplicado a almacenes de hidrógeno en la cuenca vasco-cantábrica. ,, 2023.

50 ZM Ao and FM Peeters. High-capacity hydrogen storage in al-adsorbed graphene. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 81(20):205406, 2010.

51 Elham F Mohamed. Nanotechnology: future of environmental air pollution control. Environmental Management and Sustainable Development, 6(2):429,

2017.

52 Jiaqiang Li and Yu Han. Artificial carbon allotrope γ-graphyne: Synthesis, properties, and applications. Giant, 13:100140, 2023.

53 Xin Gao, Huibiao Liu, Dan Wang, and Jin Zhang. Graphdiyne: synthesis, properties, and applications. Chemical Society Reviews, 48(3):908–936, 2019.

54 Massimiliano Bartolomei, Estela Carmona-Novillo, and Giacomo Giorgi. First principles investigation of hydrogen physical adsorption on graphynes' layers. Carbon, 95:1076–1081, 2015.

55 Changshui Huang, Yongjun Li, Ning Wang, Yurui Xue, Zicheng Zuo, Huibiao Liu, and Yuliang Li. Progress in research into 2d graphdiyne-based materials. Chemical reviews, 118(16):7744–7803, 2018.

56 Dong-Chun Yang, Ran Jia, Yu Wang, Chui-Peng Kong, Jian Wang, Yuchen Ma, Roberts I Eglitis, and Hong-Xing Zhang. Novel carbon nanotubes rolled from 6, 6, 12-graphyne: double dirac points in 1d material. The Journal of Physical Chemistry C, 121(27):14835–14844, 2017.

57 R. Varunaa and P. Ravindran. Potential hydrogen storage materials from metal decorated 2d-c2n: an ab initio study. Phys. Chem. Chem. Phys., 21:25311–25322, 2019.

58 M Hirscher, M Becher, M Haluska, A Quintel, V Skakalova, Y-M Choi, U Dettlaff-Weglikowska, S Roth, I Stepanek, P Bernier, et al. Hydrogen storage in carbon nanostructures. Journal of alloys and compounds, 330:654–658, 2002.

59 Masoumeh Shams and Adel Reisi-Vanani. Potassium decorated γ-graphyne as hydrogen storage medium: Structural and electronic

properties. International Journal of Hydrogen Energy, 44(10):4907–4918, 2019.

60 Marcus Elstner. The scc-dftb method and its application to biological systems. Theoretical Chemistry Accounts, 116:316–325, 2006.

61 Aldo Di Carlo, Alessandro Pecchia, Luca Latessa, Th Frauenheim, and Gotthard Seifert. Tight-binding dft for molecular electronics (gdftb). Introducing Molecular Electronics, pages 153–184, 2005.

62 Alberto Ambrosetti, Anthony M Reilly, Robert A DiStasio, and Alexandre Tkatchenko. Long-range correlation energy calculated from coupled atomic response functions. The Journal of chemical physics, 140(18), 2014.

63 Balint Aradi, Ben Hourahine, and Th Frauenheim. Dftb+, a sparse matrix-based implementation of the dftb method. The Journal of Physical Chemistry A, 111(26):5678–5684, 2007.

64 A You, Y Liu, X Yue, J Xiao, J Du, HZ Huang, and JG Song. Dft study of the hydrogen adsorption behavior on superalkali nli3m decorated graphyne nanosheet under ambient conditions. International Journal of Hydrogen Energy, 65:515–525, 2024.

65 Michael Gaus, Qiang Cui, and Marcus Elstner. Dftb3: Extension of the self-consistent-charge density-functional tight-binding method (scc-dftb). Journal of chemical theory and computation, 7(4):931–948, 2011.

66 Stefan Grimme, Jens Antony, Stephan Ehrlich, and Helge Krieg. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (dft-d) for the 94 elements h-pu. The Journal of chemical physics, 132(15), 2010.

67 Stefan Grimme, Stephan Ehrlich, and Lars Goerigk. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. Journal of computational chemistry, 32(7):1456–1465, 2011.

68 Myung Joon Han, Taisuke Ozaki, and Jaejun Yu. O (n) lda+ u electronic structure calculation method based on the nonorthogonal pseudoatomic orbital basis. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 73(4):045110, 2006.

69 Michael Gaus, Albrecht Goez, and Marcus Elstner. Parametrization and benchmark of dftb3 for organic molecules. Journal of Chemical Theory and Computation, 9(1):338–354, 2013.

70 Wen-Ge Han, Marcus Elstner, KJ Jalkanen, Thomas Frauenheim, and Sándor Suhai. n-acetyl-(l-ala) n methylamide helices in water solution. International Journal of Quantum Chemistry, 78(6):459–479, 2000. Hybrid scc-dftb/molecular mechanical studies of h-bonded systems and of

71 Yu Harabuchi, Miho Hatanaka, and Satoshi Maeda. Exploring approximate geometries of minimum energy conical intersections by tddft calculations. Chemical Physics Letters, 737:100007, 2019.

72 Boaz G Oliveira and Regiane CMU Araújo. Sapt: ligação de hidrogênio ou interação de van der waals? Química Nova, 35:2002–2012, 2012.

73 Alexandre Tkatchenko and Matthias Scheffler. Accurate molecular van der waals interactions from ground-state electron density format and free-atom reference data. Physical review letters, 102(7):073005, 2009.

74 Tulio Gnoatto Grison et al. Explorando correções de van der waals na descrição teórica de interações de h2o com materiais

bidimensionais. ,, 2024.

75 Marcus Elstner, Pavel Hobza, Thomas Frauenheim, Sándor Suhai, and Efthimios Kaxiras. Hydrogen bonding and stacking interactions of nucleic acid base pairs: A density-functional-theory based treatment. The Journal of Chemical Physics, 114(12):5149–5155, 2001.

76 Ben Hourahine, Bálint Aradi, Volker Blum, Frank Bonafe, Alex Buccheri, Cristopher Camacho, Caterina Cevallos, MY Deshaye, T Dumitrică, A Dominguez, et al. Dftb+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations. The Journal of chemical physics, 152(12), 2020.

77 Reinaldo Vieira Dantas Filho. Estudo dos efeitos da oxigenação e hidroxilação sobre as propriedades estruturais e eletrônicas do nitreto de boro hexagonal. ,, 2022.

78 Guilherme da Silva Lopes Fabris. Simulação atomística de sistema em nanoescala. ,, 2015.

79 B Hourahine, B Aradi, and T Frauenheim. Dftb+ and lanthanides. In Journal of Physics: Conference Series, volume 242II, page 012005. IOP Publishing, 2010.

80 B Hourahine, S Sanna, B Aradi, C Köhler, Th Niehaus, and Th Frauenheim. Self-interaction and strong correlation in dftb. The Journal of Physical Chemistry A, 111:5671–5677, 2007.

81 Jan Rezac. Empirical self-consistent correction for the description of hydrogen bonds in dftb3. Journal of Chemical Theory and Computation, 13(10):4804–4817, 2017.

82 Jan Rezac and Pavel Hobza. Advanced corrections of hydrogen bonding and dispersion for semiempirical quantum mechanical methods. Journal of Chemical Theory and Computation, 8(1):141–151, 2012.

83 Maximilian Kubillus, Tomas Kubar, Michael Gaus, Jan Rezac, and Marcus Elstner. Parameterization of the dftb3 method for br, ca, cl, f, i, k, and na in organic and biological systems. Journal of chemical theory and computation, 11(1):332–342, 2015.

84 AG Petukhov, II Mazin, Liviu Chioncel, and AI Lichtenstein. Correlated metals and the lda+ u method. Physical Review B, 67(15):153106, 2003.

85 Thomas A Niehaus. Exact non-adiabatic coupling vectors for the time-dependent density functional based tight-binding method. The Journal of Chemical Physics, 158(5), 2023.

86 Stephen C Harvey, Robert K-Z Tan, and Thomas E Cheatham III. The flying ice cube: velocity rescaling in molecular dynamics leads to violation of energy equipartition. Journal of computational chemistry, 19(7):726–740, 1998.

87 D Heringer, Thomas A Niehaus, Marius Wanko, and TH Frauenheim. Analytical excited state forces for the time-dependent density-functional tight-binding method. Journal of computational chemistry, 28(16):2589–2601, 2007.

88 Jhefferson Luiz Schiavini. Um estudo de dinâmica molecular: análise de uma membrana de nanotubo de carbono para separação de hidrogênio, dióxido de carbono e metano. B.S. thesis, Universidade

Tecnológica Federal do Paraná, 2021.

89 Thomas J Barrett and Marilyn L Minus. Nosé-hoover integrators at-a-glance: Barostat integration has a demonstrable effect on uniaxial tension results of solid materials. Journal of Chemical Theory and Computation, 2025.

90 SH [Ubar] ICHI NOSÉ. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. Molecular physics, 100(1):191–198, 2002.

91 William G Hoover. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. Physical review A, 31(3):1695, 1985.

92 Herman JC Berendsen, JPM van Postma, Wilfred F Van Gunsteren, ARHJ DiNola, and Jan R Haak. Molecular dynamics with coupling to an external bath. The Journal of chemical physics, 81(8):3684–3690, 1984.

ENTROPÍAS DE RÉNYI ESTABILIZADORAS, MAGIA CUÁNTICA Y UNIVERSALIDAD EN CADENAS CUÁNTICAS DE ESPÍN

(Plenaria)

M.Sc. EDDY ARIEL RAMIREZ TRINO

eddyarielramireztrino@gmail.com

Semblanza:

Actualmente me encuentro en una etapa avanzada de mi Ph.D. in Physics en la Universidade Federal Fluminense, Brasil. Soy licenciado en Física por la Universidad Mayor de San Andrés y tengo un Master of Science in Physics por la Universidade Federal Fluminense. Mi formación se inició en física teórica y matemática, con trabajos en gravitational Chern--Simons theory, modified gravity y field-theoretical methods. Mi investigación actual se centra en quantum spin chains y quantum many-body systems, especialmente fermionic Gaussian states, free-fermion techniques, stabilizer Rényi entropy y Shannon--Rényi entropy en modelos como transverse-field Ising, XX y XY.

Introducción

The transverse-field Ising (TFI) chain is one of the simplest quantum many-body systems in which microscopic solvability and universal critical behavior can be studied simultaneously. Since the Jordan–Wigner (JW) solution of spin chains and the analysis of the TFI model by Lieb, Schultz, Mattis and Pfeuty, this model has served as a standard laboratory for quantum phase transitions, fermionic Gaussian methods, and finite-size scaling [17,19–21]. At its self-dual critical point, the continuum limit is the Ising conformal

field theory (CFT) with central charge $c = 1/2$, making the model a bridge between exactly solvable lattice Hamiltonians and universal CFT predictions [24–26]. This combination of exact solvability and conformal universality is the reason why the critical Ising chain continues to be useful: it provides a setting where new information-theoretic probes can be tested without losing analytic control.

A traditional way of extracting universal information from critical ground states is through entanglement entropy, whose logarithmic scaling in one dimension is governed by the central charge [25,26]. However, entanglement is not the only useful probe of a quantum wave function. If a local measurement basis is fixed, the probability distribution of wave-function amplitudes defines Shannon–Rényi (SR), or participation, entropies. These quantities are basis dependent, but at criticality they nevertheless display universal subleading structures and have been extensively studied in quantum spin chains and CFT [1–5]. They therefore provide a complementary view of criticality: not through bipartite entanglement, but through the distribution of amplitudes in a physically chosen basis.

A second, more recent, diagnostic comes from quantum information theory. The stabilizer Rényi entropy (SRE) measures nonstabilizerness, or magic, namely the obstruction to describing a state by stabilizer methods and Clifford circuits [6–11]. Although originally motivated by quantum computation, SRE have become useful probes of many-body states. Recent CFT approaches show that they can encode universal information in critical systems, including size-independent terms, boundary contributions, and defect data [28,29]. Thus, for a critical lattice ground state, SR entropy and SRE ask two related but distinct questions: how the wave function is distributed in a local basis, and how far the state is from the stabilizer sector.

Fermionic Gaussian states make this comparison especially transparent. In a Gaussian wave function, computational-basis amplitudes are Pfaffians of submatrices of a pairing matrix $\mathbf{R}$, while stabilizer moments of real Gaussian states reduce to sums of minors of a correlation matrix $\mathbf{G}$ [12–14,16]. This algebraic distinction is sharpened by the stabilizer–Shannon correspondence of Ref. [15], which relates SRE of Gaussian eigenstates to SR entropies of number-conserving free fermions on a doubled system.

The purpose of this work is to present a compact comparison of these two Gaussian structures in the critical periodic Ising chain. We focus on the Rényi index $\alpha = 1/2$, where the Gaussian formulas become first moments: the SRE $M_{1/2}$ is controlled by $\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L)$, whereas the SR entropy $H_{1/2}$ of the Ising wave function itself is controlled by $\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L)$. This value is special because the absolute-value sums become analytically tractable: the stabilizer side inherits a closed product for the minor sum, while the wave-function side can be reduced to a Pfaffian sum and, using the positivity of the ferromagnetic ground state, to a closed product formula. The result is a direct finite-size comparison between wave-function amplitudes and stabilizer moments in the same critical state.

We obtain explicit expressions for $H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L)$ and $M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L)$, and then extract their large-L behavior. The leading terms are nonuniversal entropy densities, sensitive to the chosen microscopic basis. By contrast, the absence of a $\ln L$ term in the periodic chain, the common constant $-\ln 2$, and the finite-size corrections carry the imprint of the global Neveu–Schwarz (NS) parity sector and of the underlying Ising critical point. This contrasts with open critical chains, where boundary CFT predicts logarithmic contributions to SRE [15,29]. In this way, the periodic critical Ising chain provides a clean setting where microscopic Gaussian formulas and CFT finite-size intuition can be compared term by term.

Shannon–Rényi and stabilizer entropies in Gaussian states

Let $|\psi\rangle$ be a pure state on L qubits and let $\mathcal{B} = \{|x\rangle\}$ be a fixed computational basis. With $p_x = |\langle x \mid \psi\rangle|^2$, the SR entropy is

$$H_\alpha(\psi \mid \mathcal{B}) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \sum_x p_x^\alpha , \qquad \alpha > 0, \quad \alpha \neq 1. \qquad (1)$$

The limit $\alpha \to 1$ gives the Shannon entropy. This basis-dependent entropy is the standard Rényi generalization of Shannon's entropy and, in many-body wave functions, is also known as participation entropy [1–5]. In this work $\mathcal{B}$ is the occupation basis associated with the JW fermions, following the Gaussian Shannon–Rényi setup of Ref. [15].

For fermionic Gaussian eigenstates, we use the paired representation

$$\left| \mathbf{R}, \mathcal{C}\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_\mathbf{R}} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{L} a_i \, R_{ij} a_j \right) \right| \mathcal{C}\rangle, \qquad \mathbf{R}^T = -\mathbf{R}. \qquad (2)$$

Here, $a_j = c_j$ if site j is occupied in $\mathcal{C}$, and $a_j = c_j^\dagger$ otherwise. For the reference configurations used below, $\mathcal{N}_\mathbf{R} = \det(\mathbf{I} + \mathbf{R}^\dagger \mathbf{R})^{1/4}$ [12–15].

For ordered index sets $I, J \subseteq \{1, \ldots, N\}$ with $|I| = |J| = k$, let $\mathbf{M}[I, J]$ denote the corresponding $k \times k$ submatrix. We define the following two important quantities [15]:

$$\mathrm{Pf}_\beta(\mathbf{M}) = \sum_{\substack{S \subseteq [N] \\ |S| \text{ even}}} |\mathrm{pf}\mathbf{M}[S,S]|^\beta . \qquad (3a)$$

$$\mathrm{Det}_\beta(\mathbf{M}) = \sum_{k=0}^{N} \sum_{\substack{I,J \subseteq [N] \\ |I|=|J|=k}} |\det\mathbf{M}[I,J]|^\beta . \qquad (3b)$$

The first quantity is defined only for antisymmetric matrices. We denote by $\mathrm{Pf}_\beta(\mathbf{M})$ the sum of the β-th powers of all Pfaffians of $\mathbf{M}$, namely the sum of powers of Pfaffians, and by $\mathrm{Det}_\beta(\mathbf{M})$ the sum of the β-th powers of all minors of $\mathbf{M}$, namely the sum of powers of minors.

Since the occupation-basis amplitudes of the Gaussian state in Eq. (2) are Pfaffians of principal submatrices of $\mathbf{R}$, Eq. (1) gives

$$H_\alpha(\mathbf{R}) = \frac{1}{1-\alpha}\ln\left[\frac{\mathrm{Pf}_{2\alpha}(\mathbf{R})}{\mathcal{N}_{\mathbf{R}}^{2\alpha}}\right]. \qquad (4)$$

Thus the computational-basis SR entropy of a fermionic Gaussian state is a normalized sum of powers of principal sub-Pfaffians [12–15].

We now define the SRE for pure states. Let $\mathcal{P}(L)$ be the L-qubit Pauli set modulo phases. For the pure-state density matrix ρ_ψ, the Pauli distribution is $\mathbb{P}_\psi(P) = 2^{-L}|\langle\psi \mid P \mid \psi\rangle|^2$. We use [9]

$$M_\alpha(\psi) = \frac{1}{1-\alpha}\ln\sum_{P\in\mathcal{P}(L)}\left[\mathbb{P}_\psi(P)\right]^\alpha - L\ln 2. \qquad (5)$$

The stabilizer Shannon entropy is obtained by continuity at $\alpha = 1$. The subtraction fixes $M_\alpha = 0$ for stabilizer states and matches the original use of SREs as nonstabilizerness monotones [6–11,15].

For real fermionic Gaussian states, introduce the $L \times L$ correlation matrix

$$G_{jk} := \langle\mathbf{R}, \mathcal{C}\left|\left(c_j^\dagger - c_j\right)\left(c_k^\dagger + c_k\right)\right|\mathbf{R}, \mathcal{C}\rangle. \qquad (6)$$

Wick reduction of Pauli-string expectation values gives the minor formula [13,15–17]

$$M_\alpha(\mathbf{G}) = \frac{1}{1-\alpha}\ln\left[\frac{\mathrm{Det}_{2\alpha}(\mathbf{G})}{\mathrm{Det}_2(\mathbf{G})}\right]. \qquad (7)$$

For the pure Gaussian states considered here, $\mathbf{G}^T\mathbf{G} = \mathbf{I}$, hence $\mathrm{Det}_2(\mathbf{G}) = 2^L$. Equation (7) therefore becomes

$$M_\alpha(\mathbf{G}) = \frac{1}{1-\alpha}\ln\left[\frac{\mathrm{Det}_{2\alpha}(\mathbf{G})}{2^L}\right]. \qquad (8)$$

This is the pure-state Gaussian SRE used below [13–18].

Gaussian ground state of the critical Ising chain

We consider the periodic TFI chain at the self-dual point,

$$H^{\mathrm{TFI}} = -\sum_{j=1}^{L}\sigma_j^x\,\sigma_{j+1}^x - \sum_{j=1}^{L}\sigma_j^z\,, \qquad \sigma_{L+1}^\mu \equiv \sigma_1^\mu. \qquad (9)$$

Here L is even. We use $0 = \downarrow$, $1 = \uparrow$, and $n_j = c_j^\dagger c_j = \left(1 + \sigma_j^z\right)/2$. The fermion parity is

$$P_f = (-1)^{N_f} = \prod_j \left(1 - 2n_j\right), \qquad (10)$$

which equals $\prod_j \sigma_j^z$ for even L. Thus, the even-parity sector contains bitstrings with an even number of occupied fermionic sites [17,19–21].

With the JW convention

$$c_j = \prod_{\ell<j} (1 - 2n_\ell)\, \sigma_j^-, \qquad (11)$$

the periodic spin chain splits into fixed-parity fermionic sectors. In the sector $P_f = p = \pm 1$, one has $c_{L+1} = -pc_1$. The physical finite-size ground state for even L lies in the even sector $p = +1$, namely the Neveu–Schwarz sector. The allowed momenta are therefore

$$\theta_k = \frac{2\pi}{L}\left(k - \frac{1}{2}\right), \qquad k = 1, \ldots, L. \qquad (12)$$

In this sector, with $c_{L+1} = -c_1$, we have [17,19–21]

$$H = -\sum_{j=1}^{L} \left(c_j^\dagger - c_j\right)\left(c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}\right) + \sum_{j=1}^{L} \left(1 - 2c_j^\dagger c_j\right). \qquad (13)$$

After the Fourier and Bogoliubov transformations, the diagonalization is controlled by the Laurent polynomial

$$f(z) = z + 1, \qquad z = e^{i\theta}. \qquad (14)$$

The dispersion is $2\left|f\left(e^{i\theta}\right)\right|$, and the phase entering the correlation matrix is

$$s(\theta) = \frac{f\left(e^{i\theta}\right)}{|f(e^{i\theta})|}. \qquad (15)$$

The zero of f is at $z = -1$, absent from the NS grid for even L, so the finite-size ground state is nonsingular [15,17,21]. The finite-size correlation matrix is

$$G_{nm}^{(f)}(L) = \frac{1}{L}\sum_{k=1}^{L} s\,(\theta_k) e^{i\theta_k(n-m)}. \qquad (16)$$

For $f(z) = z + 1$, this gives the explicit TFI kernel

$$G_{jk}^{\mathrm{PBC}} = \frac{(-1)^{j-k}}{L} \csc\left[\frac{\pi}{L}\left(j - k + \frac{1}{2}\right)\right]. \qquad (17)$$

This **G** is the finite-size input for the stabilizer entropy through Eq. (7) [13,15–17].

The same NS Bogoliubov vacuum can be written as the Gaussian state $|\mathbf{R}, 0\rangle$ of Eq. (2). The pairing matrix $\mathbf{R}$ is fixed by the Cayley transform

$$\mathbf{R} = (\mathbf{I} + \mathbf{G})(\mathbf{I} - \mathbf{G})^{-1}, \qquad \mathbf{G} = (\mathbf{R} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{R} - \mathbf{I}). \qquad (18)$$

The sign convention is chosen so that the empty state has $\mathbf{G} = -\mathbf{I}$ and therefore $\mathbf{R} = 0$ [12–14]. The occupation-basis amplitudes of the TFI ground state are then the Pfaffian amplitudes encoded in Eq. (4): for an occupied set S, the amplitude is proportional to $\mathrm{pf}\mathbf{R}[S, S]$ when $|S|$ is even and vanishes otherwise. Hence, the even-parity structure of the NS ground state is built into the Gaussian representation, while Eqs. (7) and (17) give the corresponding stabilizer entropy [12–15].

Exact α = 1/2 results for H_(1/2) and M_(1/2)

With the finite-size Gaussian data fixed above, we now specialize the entropy formulas to $\alpha = 1/2$. Throughout this section L is even, the ground state is the NS vacuum, $\mathbf{G}_L$ denotes the kernel in Eq. (17), and $\mathbf{R}_L = (\mathbf{I} + \mathbf{G}_L)(\mathbf{I} - \mathbf{G}_L)^{-1}$ is the pairing matrix in the convention of Eq. (18). At this value of the Rényi index, the stabilizer entropy is governed by the first absolute minor moment of $\mathbf{G}_L$, whereas the SR entropy in the occupation basis is governed by the first absolute sub-Pfaffian moment of $\mathbf{R}_L$.

On the stabilizer side, Eq. (7) gives

$$M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = 2\ln\left[\frac{\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L)}{2^L}\right]. \qquad (19a)$$

$$\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L) = \sum_{k=0}^{L} \sum_{\substack{I,J\subseteq[L] \\ |I|=|J|=k}} |\det \mathbf{G}_L[I, J]|\,. \qquad (19b)$$

For the critical periodic TFI chain, the absolute minor sum has the finite-size product form [15]

$$\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L) = \prod_{r=1}^{L}\left[1 + \tan\left(\frac{(2r-1)\pi}{4L}\right)\right]. \qquad (20)$$

Combining Eqs. (19) and (20), one obtains

$$M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = 2\sum_{r=1}^{L} \ln\left[1 + \tan\left(\frac{(2r-1)\pi}{4L}\right)\right] - 2L\ln 2. \qquad (21)$$

On the wave-function side, Eq. (4) gives

$$H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = 2\ln\left[\frac{\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L)}{\mathcal{N}_{\mathbf{R}_L}}\right]. \qquad (22a)$$

$$\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L) = \sum_{\substack{S\subseteq[L] \\ |S| \text{ even}}} |\mathrm{pf}\mathbf{R}_L[S,S]|\,. \qquad (22b)$$

For the ferromagnetic convention used here, the finite-volume ground-state amplitudes in the even-parity computational sector can be chosen non-negative. After fixing this gauge, the absolute values in Eq. (22) may be dropped, and the sum of principal sub-Pfaffians reduces to a single Pfaffian by the Pfaffian minor-summation formula [22]. If $\mathbf{J}$ is the antisymmetric matrix with $J_{ij} = (-1)^{j-i-1}$ for $i < j$, then

$$\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L) = \mathrm{pf}(\mathbf{R}_L + \mathbf{J}). \qquad (23)$$

For the critical NS ground state, this Pfaffian sum gives

$$\frac{\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L)}{\mathcal{N}_{\mathbf{R}_L}} = 2^{(L-1)/2} \prod_{m=1}^{L/2} \cos\left(\frac{(2m-1)\pi}{4L}\right). \qquad (24)$$

Therefore

$$H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = 2\sum_{m=1}^{L/2} \ln\cos\left(\frac{(2m-1)\pi}{4L}\right) + (L-1)\ln 2. \qquad (25)$$

Thus, at $\alpha = 1/2$, the two Gaussian structures become directly comparable: $M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}$ is obtained from the minor moment $\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L)$, while $H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}$ is obtained from the sub-Pfaffian moment $\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L)$.

Asymptotic structure at α = 1/2

The closed formulas above allow us to extract the large-L behavior explicitly. Let $G_{\mathrm{Cat}} = 0.915965\ldots$ denote Catalan's constant. From Eq. (25), the SR entropy of the critical TFI ground state in the occupation basis is

$$H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = \frac{2G_{\mathrm{Cat}}}{\pi} L - \ln 2 + \frac{\pi}{24L} + O(L^{-3}). \qquad (26)$$

The coefficient $2G_{\mathrm{Cat}}/\pi$ is the extensive participation-entropy density. It depends on the microscopic occupation basis and is therefore not a universal CFT number. The absence of a $\ln L$ term is instead structural: for a periodic full chain there is no physical boundary, so no boundary logarithm is generated. The constant term $-\ln 2$ reflects the global even-parity support of the NS ground state. The $1/L$ correction is the first finite-size critical correction and is naturally associated with the long-wavelength Ising sector, although the observable remains basis dependent.

On the stabilizer side, Eq. (21) gives

$$M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = \left(\frac{4G_{\mathrm{Cat}}}{\pi} - \ln 2\right) L - \ln 2 + \frac{\pi}{12L} + O(L^{-3}). \qquad (27)$$

This agrees with the periodic-chain scaling structure obtained from the SRE-SR correspondence of Ref. [15]: for the critical TFI chain with periodic boundary conditions, the SRE has the CFT-type form $M_\alpha^{\mathrm{PBC}}(L) = m_\alpha L + b_\alpha \ln L - c_\alpha + o(1)$, with $b_\alpha = 0$. At $\alpha = 1/2$, Eq. (27) identifies

$$m_{1/2}^{\mathrm{TFI}} = \frac{4G_{\mathrm{Cat}}}{\pi} - \ln 2, \qquad (28a)$$

$$b_{1/2}^{\mathrm{PBC}} = 0, \qquad (28b)$$

$$c_{1/2}^{\mathrm{PBC}} = \ln 2. \qquad (28c)$$

Thus, the exact product formula reproduces the expected absence of a logarithmic term in the periodic geometry and fixes the finite constant in our normalization.

The two asymptotic expansions are related more strongly than just at leading order. The finite-size products imply the exact identity

$$M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = 2H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) - (L-1)\ln 2, \qquad (29)$$

which explains why the $1/L$ coefficient in Eq. (27) is twice the one in Eq. (26). The extensive densities are different because $H_{1/2}$ probes wave-function amplitudes through $\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L)$, whereas $M_{1/2}$ probes stabilizer moments through $\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L)$. Nevertheless, both

quantities carry the same constant contribution, $-\ln 2$, associated with the same global parity sector.

It is useful to contrast this with the open critical TFI chain. In open boundary conditions, Ref. [15] finds a logarithmic contribution to the SRE. This is consistent with the CFT interpretation: open chains introduce physical boundaries, and the logarithmic term encodes boundary critical data rather than a microscopic entropy density. In the periodic chain studied here, the absence of boundaries removes this source of $\ln L$, leaving a bulk nonuniversal density, a sector-dependent constant, and power-law finite-size corrections. Thus, for the full periodic critical TFI chain, the comparison with the CFT scaling form is $H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = h_{1/2}L - c_H + O(L^{-1})$, $M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = m_{1/2}L - c_M + O(L^{-1})$, with $h_{1/2} = 2G_{\mathrm{Cat}}/\pi$, $m_{1/2} = 4G_{\mathrm{Cat}}/\pi - \ln 2$, and $c_H = c_M = \ln 2$. The equality of the constants does not imply equality of the entropies; rather, it shows that the Pfaffian wave-function moment and the stabilizer minor moment retain the same global-sector contribution while differing in their microscopic bulk densities.

Conclusions

We have compared two basis-dependent Rényi probes of the critical periodic TFI ground state. The first is the SR entropy H_α, which measures the distribution of wave-function amplitudes in the JW occupation basis. The second is the SRE M_α, which measures nonstabilizerness through Pauli expectation values. Although both quantities are evaluated on the same Gaussian ground state, they are organized by different finite-size objects: H_α is naturally expressed through Pfaffian amplitudes of the pairing matrix $\mathbf{R}_L$, while M_α is expressed through minor sums of the correlation matrix $\mathbf{G}_L$.

At $\alpha = 1/2$, this distinction becomes particularly explicit. The entropy index produces first absolute moments: $H_{1/2}$ depends on $\mathrm{Pf}_1(\mathbf{R}_L)$, while $M_{1/2}$ depends on $\mathrm{Det}_1(\mathbf{G}_L)$. For the critical NS ground state, both objects admit closed finite-size formulas. The stabilizer result is consistent with the known Gaussian SRE framework, where stabilizer moments reduce to minor sums of the correlation matrix. Separately, the positivity of the

ferromagnetic ground-state amplitudes allows the absolute Pfaffian sum entering OBJ to be reduced to a single Pfaffian and then to a closed product expression.

The resulting asymptotic expansions separate microscopic and universal information. The extensive coefficients $h_{1/2} = 2G_{\mathrm{Cat}}/\pi$ and $m_{1/2} = 4G_{\mathrm{Cat}}/\pi - \ln 2$ are basis-dependent entropy densities and should not be interpreted as universal CFT data. In contrast, the absence of a logarithmic term is a structural feature of the full periodic chain, where no physical boundary is present. Both entropies contain the same constant contribution $-\ln 2$, which reflects the restriction of the NS ground state to the even fermion-parity sector. The $1/L$ corrections are consistent with critical finite-size scaling and are related by the exact identity $M_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) = 2H_{1/2}^{\mathrm{TFI}}(L) - (L-1)\ln 2$.

This comparison clarifies the complementary roles of wave-function and SRE at Ising criticality. The former probes the amplitude structure of the Gaussian ground state, while the latter probes its Pauli-moment structure and magic content. The critical Ising chain is therefore not only a solvable model for entanglement and CFT scaling, but also a useful benchmark for understanding how stabilizer magic and participation-type entropies encode microscopic and universal information. Natural extensions include open chains, where boundary logarithms appear, other Rényi indices, and more general free-fermion critical points where the interplay between Pfaffian amplitudes, minor sums, and CFT data may be richer.

Acknowledgements. Eddy Ramirez acknowledges support from CNPq (Process No. 141672/2023-4).

Referencias bibliográficas

- [1] C. E. Shannon, A Mathematical Theory of Communication, Bell Syst. Tech. J. **27**, 379–423, 623–656 (1948). DOI: https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x
- [2] A. Rényi, On Measures of Entropy and Information, Proc. Fourth Berkeley Symp. Math. Statist. Prob. **1**, 547–561 (1961). URL: https://digitalassets.lib.berkeley.edu/math/ucb/text/math_s4_v1_article-27.pdf

- [3] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions, Phys. Rev. B **80**, 184421 (2009). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.184421; arXiv:0906.1153
- [4] J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier, Phase transition in the Rényi-Shannon entropy of Luttinger liquids, Phys. Rev. B **84**, 195128 (2011). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.195128; arXiv:1104.2544
- [5] J.-M. Stéphan, Shannon and Rényi mutual information in quantum critical spin chains, Phys. Rev. B **90**, 045424 (2014). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.045424; arXiv:1403.6157
- [6] D. Gottesman, Stabilizer Codes and Quantum Error Correction, Ph.D. thesis, California Institute of Technology (1997). arXiv:quant-ph/9705052
- [7] V. Veitch, S. A. H. Mousavian, D. Gottesman, and J. Emerson, The resource theory of stabilizer quantum computation, New J. Phys. **16**, 013009 (2014). DOI: https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/1/013009; arXiv:1307.7171
- [8] M. Howard and E. Campbell, Application of a resource theory for magic states to fault-tolerant quantum computing, Phys. Rev. Lett. **118**, 090501 (2017). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.090501; arXiv:1609.07488
- [9] L. Leone, S. F. E. Oliviero, and A. Hamma, Stabilizer Rényi Entropy, Phys. Rev. Lett. **128**, 050402 (2022). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.050402; arXiv:2106.12587
- [10] S. F. E. Oliviero, L. Leone, and A. Hamma, Magic-state resource theory for the ground state of the transverse-field Ising model, Phys. Rev. A **106**, 042426 (2022). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.042426; arXiv:2205.02247
- [11] L. Leone and L. Bittel, Stabilizer entropies are monotones for magic-state resource theory, Phys. Rev. A **110**, L040403 (2024). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.110.L040403; arXiv:2404.11652

- [12] S. Bravyi, Lagrangian representation for fermionic linear optics, Quantum Inf. Comput. **5**, 216–238 (2005). DOI: https://doi.org/10.26421/QIC5.3-3; arXiv:quant-ph/0404180
- [13] B. Tarighi, R. Khasseh, and M. A. Rajabpour, Efficient representation of Gaussian fermionic pure states in noncomputational bases, Phys. Rev. A **109**, 062214 (2024). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.062214; arXiv:2403.03289
- [14] M. A. Rajabpour, M. A. Seifi Mirjafarlou, and R. Khasseh, Explicit Pfaffian formula for amplitudes of fermionic Gaussian pure states in arbitrary Pauli bases, Phys. Rev. B **111**, 235102 (2025). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.235102; arXiv:2502.04857
- [15] M. A. Rajabpour, Stabilizer–Shannon Rényi Equivalence: Exact Results for Quantum Critical Chains, arXiv:2509.10700 (2025). DOI: https://doi.org/10.48550/arXiv.2509.10700
- [16] I. Peschel and V. Eisler, Reduced density matrices and entanglement entropy in free lattice models, J. Phys. A **42**, 504003 (2009). DOI: https://doi.org/10.1088/1751-8113/42/50/504003; arXiv:0906.1663
- [17] F. Franchini, An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems, Lecture Notes in Physics **940**, Springer (2017). DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-48487-7
- [18] O. Knill, Cauchy–Binet for pseudo-determinants, Linear Algebra Appl. **459**, 522–547 (2014). DOI: https://doi.org/10.1016/j.laa.2014.07.013; arXiv:1306.0062
- [19] P. Jordan and E. Wigner, Über das Paulische Äquivalenzverbot, Z. Phys. **47**, 631–651 (1928). DOI: https://doi.org/10.1007/BF01331938
- [20] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Two soluble models of an antiferromagnetic chain, Ann. Phys. **16**, 407–466 (1961). DOI: https://doi.org/10.1016/0003-4916(61)90115-4

- [21] P. Pfeuty, The one-dimensional Ising model with a transverse field, Ann. Phys. **57**, 79–90 (1970). DOI: https://doi.org/10.1016/0003-4916(70)90270-8
- [22] M. Ishikawa and M. Wakayama, Minor summation formula of Pfaffians, Linear Multilinear Algebra **39**, 285–305 (1995). DOI: https://doi.org/10.1080/03081089508818403
- [23] R. A. Horn and C. R. Johnson, Matrix Analysis, 2nd ed., Cambridge University Press (2012). DOI: https://doi.org/10.1017/CBO9781139020411
- [24] S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, 2nd ed., Cambridge University Press (2011). DOI: https://doi.org/10.1017/CBO9780511973765
- [25] P. Calabrese and J. Cardy, Entanglement entropy and quantum field theory, J. Stat. Mech. **2004**, P06002 (2004). DOI: https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/P06002; arXiv:hep-th/0405152
- [26] P. Calabrese and J. Cardy, Entanglement entropy and conformal field theory, J. Phys. A **42**, 504005 (2009). DOI: https://doi.org/10.1088/1751-8113/42/50/504005; arXiv:0905.4013
- [27] I. Affleck and A. W. W. Ludwig, Universal noninteger "ground-state degeneracy" in critical quantum systems, Phys. Rev. Lett. **67**, 161–164 (1991). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.67.161
- [28] M. Hoshino, M. Oshikawa, and Y. Ashida, Stabilizer Rényi Entropy and Conformal Field Theory, arXiv:2503.13599 (2025). DOI: https://doi.org/10.48550/arXiv.2503.13599
- [29] M. Hoshino and Y. Ashida, Stabilizer Rényi Entropy Encodes Fusion Rules of Topological Defects and Boundaries, arXiv:2507.10656 (2025). DOI: https://doi.org/10.48550/arXiv.2507.10656

COMUNICACIONES CIENTÍFICAS

EFECTOS DE RADIACIÓN POR NEUTRONES EN MATERIALES EN UN REACTOR NUCLEAR DE INVESTIGACIÓN

(Comunicación)

WILMER APAZA CONDORI
ing.sitewil@gmail.com

Semblanza:

Ingeniero Electromecánico, con posgrado de especialización en Aplicaciones Tecnológicas Nucleares en el Instituto Balseiro – Universidad Nacional de Cuyo (Argentina). Cuenta con cursos de especialización en Escuela de Reactores de Investigación y gestión del envejecimiento de reactores de investigación. Actualmente se desempeña en la Agencia Boliviana de Energía Nuclear (ABEN) en el proyecto de construcción, puesta en marcha y operación del Reactor RB-01

Introducción

Los reactores nucleares de investigación constituyen infraestructuras estratégicas para el desarrollo científico y tecnológico de un país. En Bolivia, el reactor de investigación RB-01 representa un avance significativo en aplicaciones nucleares orientadas a investigación, formación académica y producción de radioisótopos.

Uno de los componentes más importantes para la seguridad y vida útil del reactor es la vasija, debido a que alberga el núcleo y el sistema de moderación y refrigeración. Durante la operación, los materiales estructurales son sometidos a un flujo continuo de

neutrones rápidos, lo que genera desplazamientos atómicos, formación de defectos cristalinos y modificaciones microestructurales.

Este fenómeno, conocido como fragilización por irradiación neutrónica, constituye uno de los principales mecanismos de degradación en componentes estructurales sometidos a exposición neutrónica prolongada.

El objetivo del presente trabajo es evaluar teóricamente la fluencia neutrónica esperada en componentes estructurales asociados al reactor RB-01 y analizar sus implicaciones respecto a la integridad estructural, fragilización y gestión del envejecimiento.

Metodología y Desarrollo teórico

El estudio desarrollado corresponde a una investigación teórico-descriptiva basada en revisión documental, análisis normativo y cálculo analítico de parámetros neutrónicos asociados al reactor RB-01.

Las principales fuentes de información utilizadas fueron estándares internacionales ISO 19226:2017, documentos técnicos del OIEA, literatura especializada publicada en revistas científicas y parámetros neutrónicos proporcionados por el proveedor tecnológico del reactor.

Para la estimación de la fluencia neutrónica acumulada se consideraron valores de flujo de neutrones rápidos con energías mayores a 0,1 MeV. El análisis incluyó regiones estructurales como el core plate, core barrel y zonas próximas a la vasija del reactor.

Asimismo, se considera el uso de herramientas de simulación neutrónica basadas en el método Monte Carlo, como MCNP, con el objetivo de modelar la distribución espacial

del flujo neutrónico y complementar futuras mediciones experimentales mediante dosimetría neutrónica.

Fragilización y efectos de irradiación neutrónica

El mecanismo principal de degradación por irradiación neutrónica se origina por el desplazamiento de átomos en la red cristalina debido al impacto de neutrones rápidos. Este fenómeno produce vacancias, intersticiales y formación de defectos cristalinos que modifican las propiedades mecánicas de los materiales.

Fluencia de Neutrones

La cantidad total de neutrones de alta energía (> 0.1 MeV) acumulada es el factor primario que determina el daño estructural acumulado.

El análisis de la distribución espacial del flujo neutrónico se debe llevar a cabo en diferentes regiones del reactor, incluyendo el núcleo, el reflector, la superficie interna de la vasija y puntos externos de interés dosimétrico. Esta caracterización requiere conocimientos, experiencia específicos y detallados de la geometría tridimensional del reactor, la potencia térmica de operación, la composición isotópica del combustible y las propiedades de los materiales estructurales. Los valores serán determinados experimentalmente que serán determinados experimentalmente mediante técnicas de activación neutrónica con monitores que ayuden a determinar la fluencia para neutrones rápidos que son pequeñas láminas o "lentejas" de un material específico (como el Au-197, aunque también se usan Manganeso, Hierro, níquel, etc.) que se introducen en el reactor.

La Figura 1 ilustra la vista interna de la vasija de presión del reactor rápido de investigación MBIR durante los ensayos de control de calidad previos al ensamblaje del

núcleo. Este componente constituye la barrera estructural primaria expuesta al daño por radiación neutrónica.

Figure 1: Montaje de prueba de la vasija del reactor de investigación MBIR realizado



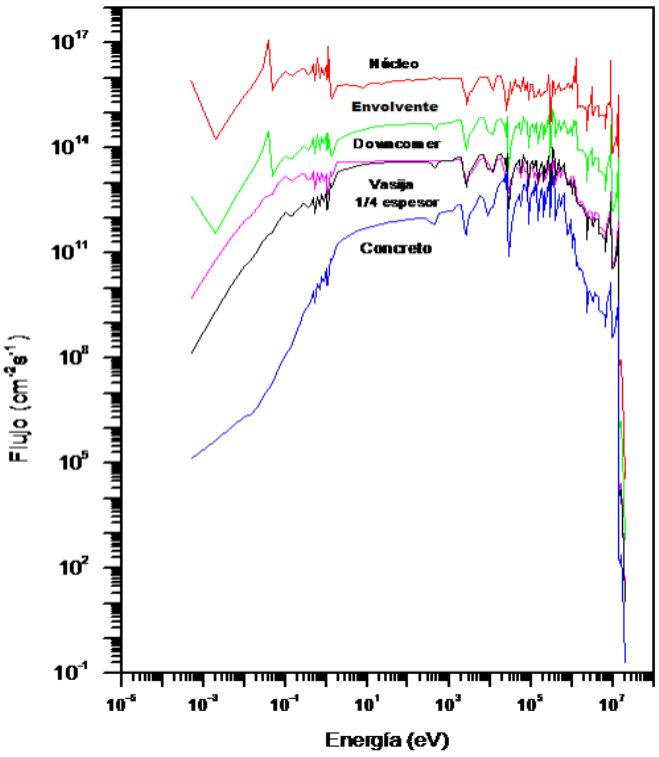
Ref.: El MBIR es un reactor rápido refrigerado por sodio de 150 MWt, https: //en.cnnc.com.cn/es/2022-01/26/c_1026134.html

Simulación neutrónica y aplicación a programas de vigilancia

El presente trabajo corresponde a una evaluación teórica preliminar basada en cálculos analíticos y revisión bibliográfica. Así también se prevé el uso de simuladores para la evaluación continua de los parámetros analizados. Estos instrumentos posibilitan la modelación de toda la geometría del reactor, del espectro de fisión de la fuente de neutrones y el cálculo del flujo neutrónico en cualquier punto que sea relevante, dividiéndolo por intervalos energéticos. La simulación permite la obtención de criterios esenciales para el diseño del programa de vigilancia, tales como la ubicación ideal de las cápsulas o cupones. Los resultados se integrarán en los programas de gestión de envejecimiento y en los planes de inspección de vigilancia, permitiendo establecer límites operacionales seguros y tomar decisiones fundamentadas sobre la integridad estructural de la vasija a lo largo de toda la vida útil del reactor. Los límites de fluencia neutrónica rápida para los componentes internos se definieron con base en criterios

estándar de integridad estructural reportados en la literatura. Para el acero inoxidable de la placa soporte (core plate), el umbral para fenómenos de degradación como el hinchamiento por irradiación se establece en aproximadamente 1 x 10^{24} n/m² (E_n > 0.1 MeV) . En consecuencia, el valor de diseño adoptado para este componente fue de 1.4 x 10^{24} n/m². Para el barril del núcleo (core barrel), que experimenta una atenuación del flujo, se definió un límite de 4.8 x 10^{23} n/m², valor que es consistente con la atenuación esperada a través de la estructura del núcleo.

Figura 2: Espectros de flujo neutrónico en las diferentes regiones del modelo del reactor BWR



Ref.: (Martínez Caballero, 2011, [11])

La Figura 2 ilustra la atenuación del flujo de neutrones en función de la distancia hacia los componentes externos del reactor. Este comportamiento se atribuye a los mecanismos de termalización, donde los neutrones disminuyen su energía por dispersión elástica. La caída del flujo es el resultado directo de la combinación de estas interacciones de

dispersión y de las secciones eficaces de captura neutrónica de los materiales que atraviesan.

Según la Normativa Rusa NP-089-15, fijan como límite de impacto por la radiación hasta una fluencia de $1,5x10^{25}$ n/m2 (con $E_n \geq 0.1$ MeV) en la reducción de las propiedades físicas y mecánicas (incluidas las características de resistencia a la fisuración) de los aceros austeniticos.

Fragilización y composición Química del acero:

El mecanismo primario de fragilización tiene su origen en los procesos de endurecimiento que se desarrollan a causa de los cambios microestructurales originados como consecuencia de la irradiación, como ya indicamos anteriormente, pero es importante recalcar los siguientes puntos.

Generación de defectos en la red cristalina motivados por el impacto de los neutrones dando lugar a un desplazamiento en cascada.

Formación de precipitados ricos en Cu, F y Ni.

Anclaje de las dislocaciones en las nanoestructuras generadas conduciendo al endurecimiento del acero.

Temperatura y choque Térmico a Presión (PTS)

La temperatura ambiental y de parada constituye un factor crítico en la integridad estructural de la vasija de presión, interactuando de forma sinérgica con los efectos de la irradiación neutrónica. Aunque durante la operación del reactor de investigación el calor generado mantiene los componentes a temperaturas elevadas, las fases de parada por mantenimiento prolongado exponen la estructura a las condiciones térmicas de diseño del sitio (como las bajas temperaturas características de La Paz). Con el avance del ciclo de vida del reactor, el bombardeo continuo de neutrones rápidos provoca el desplazamiento de la temperatura de referencia de transición de ductilidad nula (ΔRT_{NDT}) hacia valores considerablemente más altos debido a la acumulación de defectos

cristalinos y la formación de clústeres de soluto. Si el material no posee una RT_{ND} inicial severamente restringida (inferior a 0 °C), el envejecimiento por radiación puede elevar este umbral por encima de la temperatura del refrigerante en estado de parada. Bajo este escenario, el acero ferrítico de la vasija operaría en su región de comportamiento frágil fuera de línea, lo que anula su tenacidad a la fractura y constituye un aspecto relevante dentro de la evaluación integral del envejecimiento estructural ante transitorios de presión o choques térmicos imprevistos.

Flujo Neutrónico (Tasa de daño)

La velocidad a la que los neutrones inciden sobre el material afecta la cinética de formación de defectos (efecto flujo). El flujo de neutrones rápidos medido con un detector por activación a umbral Fe54, Ni58, Cu63, etc. puede expresarse en "flujo equivalente de fisión".

¿Cuál es la importancia de los neutrones térmicos en los defectos, el núcleo del hierro, por captura de un neutrón térmico?, emite una lluvia de rayos gamma y un átomo de retroceso susceptible de crear defectos.

Aunque diversos estudios han analizado la contribución de neutrones térmicos en la generación de defectos, la evidencia experimental indica que el daño predominante en aceros estructurales está asociado principalmente a neutrones rápidos [2].

Calculo de fluencia:

En los componentes de Core Plate, Core Barrel y superficie en la vasija mostrados los valores calculados están por debajo del límite de seguridad.

Datos de entrada:

Flujo rápido en el núcleo para un reactor de mediana potencia (máxima): $8.6x10^{12}$ $n*cm^{-2}*s^{-1}$= $8.6x10^{16}$ $n*m^{-2}*s^{-1}$. (se considera un valor estimativo conservador basado en literatura

técnica y comportamiento típico de reactores piscina abierta de baja a media potencia de $5x10^{-4}$ $n*m^{-2}*s^{-1}$).

Tiempo acumulado de operación para 30 años considerando 2000 h/año: $t=2.16x10^{8}$ s

Calculo:

Flujo en la superficie de la vasija:

$\phi= 8.6x10^{16} \times 5x10^{-4} = 4.3x10^{13}$ $n*m^{-2}*s^{-1}$

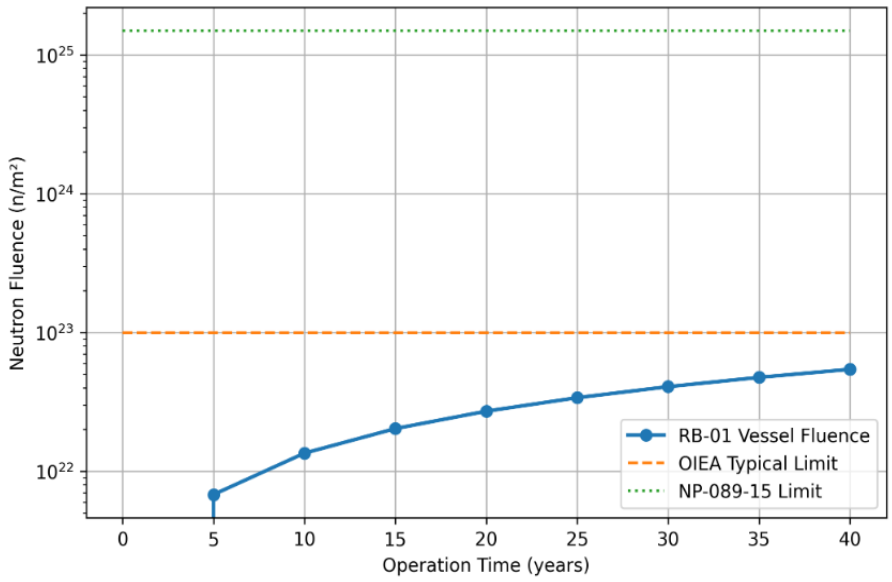
Fluencia en la superficie de la vasija:

Fluencia $= 4.3x10^{13}$ $n*m^{-2}*s^{-1} \times 2.16x10^{8}$ s $= 9.29x10^{21}$ n/m^2 (rango: $1.9x10^{21}$ a $1.9x10^{22}$) debido a incertidumbres en la atenuación.

Comparación con límites de estándares internacionales

Fuente normativa	Límite de fluencia ($n*m^{-2}$)	Fluencia calculada ($n*m^{-2}$)
Normativa rusa NP-089-15	$1.5x10^{25}$	$9.29x10^{21}$
OIEA (rango típico)	10^{22} - 10^{23}	$9.29x10^{21}$

Figura 3: Comportamiento de la fluencia vs. años de operación



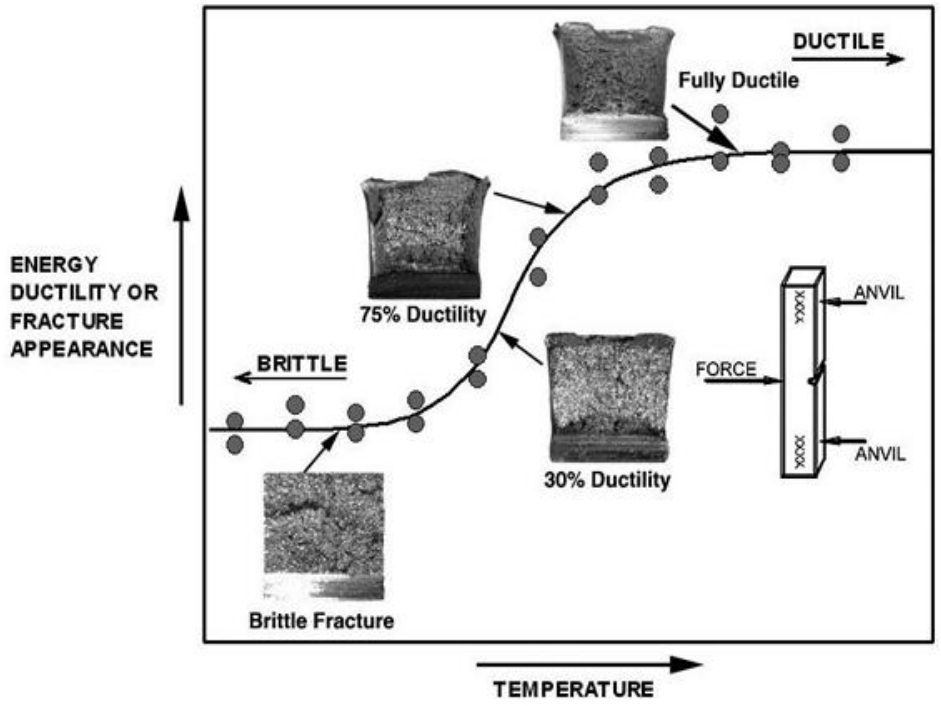
Implicaciones para el Plan de Envejecimiento

A pesar de esta condición favorable, la normativa del OIEA (SSG-10, SSG-48) y las buenas prácticas internacionales recomiendan implementar un **Programa de Vigilancia (Surveillance Program)**, **Programa de Envejecimiento (Ageing Management)** incluso en reactores de baja potencia, con los siguientes elementos:

1. **Dosimetría neutrónica:** Colocación de detectores de fluencia (cápsulas con Fe, Cu, Al, Ni) en posiciones representativas de la vasija, se realiza el análisis pertinente.
2. **Muestras de material:** Probetas de acero similar al de la vasija (material de referencia y material irradiado) para ensayos mecánicos periódicos (tracción, fractura, etc.).
3. **Intervalo de monitoreo:** Inspecciones In-service cada 5-10 años o al alcanzar una fluencia acumulada predefinida, según estudios y análisis.
4. **Análisis predictivo:** Ajuste de curvas de fragilización (como la fórmula de Reglamento ASME, Sección III, Apéndice G o las tendencias del OIEA para reactores de investigación).

La figura 4 muestra evidencia que la exposición prolongada al flujo de neutrones rápidos en reactores nucleares induce el fenómeno de fragilización por irradiación, el cual desplaza mecánicamente esta curva completa hacia la derecha (mayores temperaturas). Este desplazamiento incrementa la Temperatura de Transición Dúctil-Frágil (DBTT), reduciendo la tenacidad al impacto del componente y elevando el riesgo de propagación de fisuras ante choques térmicos o presurizaciones imprevistas.

Figura 4: Transición dúctil-frágil y efecto de la fragilización en aceros de componentes de presión



Limitación de análisis

Este trabajo se basa en cálculos teóricos y datos del proveedor. Una vez que el reactor esté en operación, se deberán realizar **mediciones experimentales** de flujo y cálculos fluencia mediante activación de monitores (Ni, Fe, etc.) para confirmar los valores reales en la pared de la vasija.

La fuerte dependencia de los daños con el espectro de neutrones cuanto el reactor entre en operación hará que resulte problemático la evaluación de los mismos y su comparación cuando el material ha sido irradiado en reactores distintos o en lugares distintos del mismo reactor, por lo que se debe tomar las precauciones necesarias.

Conclusión

Se ha desarrollado un marco teórico-metodológico para evaluar la fragilización por neutrones en la vasija del reactor de investigación RB-01 de Bolivia (200 kW térmicos).
El valor de nivel de fluencia es significativamente inferior a los umbrales reconocidos por la literatura (10^{22} - 10^{23} $n \cdot m^{-2}$) OIEA para la normativa rusa NP-089-15 se tiene el valor de $1{,}5x10^{25}$ $n \cdot m^{-2}$ (con En≥ 0.1 MeV).
El reactor Boliviano operara en una zona segura desde el punto de vista de fragilización por neutrones durante toda su vida útil y demuestra que los datos tienen un margen de diseño conservador, evidenciando un margen conservador adecuado para criterios de integridad estructural.
Se implementará un Programa de Gestión de Envejecimiento que incluya:
Un programa de vigilancia dosimétrica para medir la fluencia real.
Revisiones periódicas de la integridad estructural.
Simulación y cálculos para las verificaciones correspondientes.

Referencias bibliográficas

- [1] International Organization for Standardization. (2017). Nuclear energy — Determination of neutron fluence and displacement per atom (dpa) in reactor vessel and internals (ISO Standard No. 19226:2017).
- [2] López Jiménez, J. (1978). Evaluación de los defectos inducidos por la radiación neutrónica en los aceros de vasijas (J.E.N. 419). Junta de Energía Nuclear.
- [3] International Atomic Energy Agency. (1988). Analysis of TRIGA application for irradiation of power reactor pressure vessel specimens. IAEA. https://inis.iaea.org/records/vr1c2-gdz10

- [4] Pichon, C., Brillaud, C., Deydier, D., Alberman, A., & Soulat, P. (2000). Neutron spectrum effect and damage analysis on pressure vessel steel irradiation behaviour. En ASTM Special Technical Publication. ASTM International.
- [5] International Atomic Energy Agency. (2025). Reactor dosimetry: Determination of neutron fluence at reactor pressure vessels and internals. IAEA INIS Repository. https://inis.iaea.org/
- [6] International Atomic Energy Agency. (2025). Reactor pressure vessel surveillance and neutron dosimetry. IAEA. https://inis.iaea.org/
- [7] International Atomic Energy Agency. (2010). *Final report of the 1st ex-vessel neutron dosimetry installation and evaluations for Ulchin Unit 2 reactor pressure vessel* (KAERI/CR--376/2010). IAEA.
- [8] International Atomic Energy Agency. (2015). Research reactor ageing management (Safety Report Series No. 88). IAEA.
- [9] Organismo Internacional de Energía Atómica. (2018). Ageing management and development of a programme for long term operation of nuclear power plants (IAEA Safety Standards Series No. SSG-48).
- [10] Organismo Internacional de Energía Atómica. (2013). Ageing management and development of a programme for irradiation embrittlement of reactor pressure vessels in nuclear power plants (IAEA Safety Standards Series No. SSG-10).
- [11] Organismo Internacional de Energía Atómica. (2016). Safety of research reactors (IAEA Safety Standards Series No. SSR-3).
- [12] Martínez Caballero, E. (2011). Cálculo de flujo neutrónico y fluencia en la envolvente del núcleo y la vasija de un reactor BWR [Tesis de maestría, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional].

DOSIMETRÍA PERSONAL EN INSTALACIONES DE REACTORES DE INVESTIGACIÓN: CASO DEL RB-01

(Comunicación)

M.Sc. Ing. SARA FERNANDEZ CALLE

sarafernandezcalle131@gmail.com

Semblanza:

Sara Fernandez Calle es ingeniera química de profesión, cuenta con maestrías en Física y Tecnologías Nucleares y Protección Radiológica en Instalaciones Radioactivas y Nucleares obtenidas en Rusia y España. Además, realizó una capacitación especifica en protección radiológica para reactores nucleares de investigación en Tomsk -Rusia. Actualmente trabaja en la Agencia Boliviana de Energía Nuclear en el área técnica del Centro de Investigación y Desarrollo de Tecnologías Nucleares (CIDTN).

Introducción

El Reactor de Investigación Boliviano RB-01 formará parte del Centro de Investigación y Desarrollo de Tecnología Nuclear (CIDTN), que representa un hito en el desarrollo de la tecnología nuclear en Bolivia. Esta instalación es diseñada para investigación científica, producción de radioisótopos médicos e industriales y análisis por activación neutrónica, genera campos de radiación que demandan sistemas de dosimetría personal.

La protección de los trabajadores ocupacionalmente expuestos (TOE) frente a las radiaciones ionizantes constituye uno de los pilares de la seguridad nuclear. A escala global, el OIEA establece (IAEA GSR Part 3, 2014) los estándares básicos de seguridad

para la protección contra las radiaciones ionizantes. Bolivia, como Estado Miembro del OIEA, se encuentra comprometida con la aplicación de estos estándares, los cuales se articulan con la reglamentación nacional y con las normas técnicas de diseño adoptadas para el RB-01.

El objetivo del presente trabajo es presentar una propuesta de la dosimetría personal para el RB-01, analizando su fundamento normativo, los instrumentos y procedimientos adoptados y la gestión de los registros dosimétricos.

Antecedentes del RB-01

El RB-01 es un reactor tipo piscina de agua ligera, diseñado para operar en el rango de potencias de investigación, con canales experimentales verticales (CEV) y horizontales (CEH), un laboratorio de radioisótopos (LRI) y un laboratorio de análisis por activación neutrónica (LAAN). La seguridad radiológica en el RB-01 sigue las normas nacionales e internacionales alineadas con las recomendaciones del OIEA.

El edificio del complejo del reactor alberga una zonificación radiológica diferenciada: zonas de libre acceso (ZAL), zonas de acceso controlado (ZAC) con salas de estancia permanente, periódica o sin personal.

Alcance del estudio

El análisis abarca al Reactor Nuclear de investigación RB-01, cubriendo los espacios donde el personal puede verse expuesto a radiación ionizante durante la operación normal del reactor.

METODOLOGÍA/DESARROLLO TEÓRICO

El presente trabajo corresponde a la revisión teórica de tipo analítica-propositiva. Se analizaron los siguientes documentos: las recomendaciones de la ICRP 103, las Normas Básicas de Seguridad de la OIEA (GSR Part 3, 2014), la Guía de Seguridad Específica SSG-47 sobre Protección Radiológica Ocupacional y la normativa nacional boliviana, Reglamento N° 1 de Seguridad y Protección Radiológica (DS N° 5290). En base a estos documentos se elabora la propuesta la presente propuesta.

Principios de protección radiológica aplicados en el RB-01

El sistema de protección radiológica del OIEA descansa en tres principios fundamentales que estructuran toda la metodología dosimétrica del RB-01:

- ✓ Justificación: toda práctica que implique exposición a radiaciones ionizantes debe reportar más beneficio que daño. Para el RB-01, la investigación científica, la producción de radioisótopos, análisis por activación neutrónica y la formación de recursos humanos justifican plenamente la operación del reactor.
- ✓ Optimización (ALARA – As Low As Reasonably Achievable): las dosis deben mantenerse tan bajas como sea razonablemente posible, considerando factores económicos y sociales. En el RB-01, esto se materializa mediante la protección por cantidad (minimizar actividad en el puesto de trabajo), protección por distancia, tiempo y blindaje.
- ✓ Limitación: las dosis individuales no deben superar los límites establecidos. El sistema de dosimetría personal es el mecanismo de verificación de este principio

Tipos de radiación y factores de ponderación en el RB-01

En el RB-01 se identifica como principales fuentes de radiación durante la operación: el núcleo del reactor (neutrones térmicos y rápidos + gamma), el circuito primario (gamma), el laboratorio de radioisótopos y de Activación neutrónica (beta y gamma). De acuerdo con la ICRP 103, cada tipo de radiación posee un factor de ponderación (WR)

que determina su eficacia biológica relativa. La Tabla 1 resume los valores relevantes para el entorno del RB-01:

Tabla 1: Tipos de radiación en el RB-01 y factores de ponderación según ICRP 103 (2007).

Tipo de Radiación	Factor WR (ICRP 103)	Presencia en RB-01	Fuente principal
Fotones γ	1	Muy alta	Núcleo
Neutrones térmicos (<1 eV)	2.5	Moderada	Núcleo
Neutrones interm. (1 eV–100 keV)	10–20	Moderada	Reflector, canales
Neutrones rápidos (>2 MeV)	5–20	Moderada	Fisión directa
Radiación beta y gamma	1	Moderada	Productos de activación, LRI y LAAN

Clasificación del personal y límites de dosis

La Tabla 2 presenta una la clasificación del TOE y los límites de dosis establecidos por las distintas normas aplicables al RB-01:

Tabla 2: Límites de dosis del RB-01 según GSR Part 3. (*) La ICRP 103 redujo este valor a 20 mSv/año; se recomienda adoptar este criterio más restrictivo.

Parámetro dosimétrico	NRB-99/2009 (aplicado en RI)	IAEA BSS GSR Part 3	D.S. Bolivia 5290
Dosis efectiva (TOE)	20 mSv/año promedio 5 años, máx 50 mSv	20 mSv/año promedio 5 años	20 mSv/año
Cristalino del ojo (TOE)	150 mSv/año	20 mSv/año (rev. 2011)	20 mSv/año
Piel / manos y pies (TOE)	500 mSv/año	500 mSv/año	500 mSv/año

Dosis efectiva (población)	1 mSv/año promedio 5 años	1 mSv/año	1 mSv/año

Se establece para mujeres en estado de gestación se estable el límite de dosis del público.

Restricción de dosis

En el RB-01 se establece una restricción de dosis, que es el valor prospectivo de dosis individual que se utiliza como techo o límite superior al momento de optimizar la protección radiológica, cuando se supera, desencadenan acciones de investigación y corrección sin implicar necesariamente una violación del límite.

Zonificación radiológica del RB-01

El sistema de barreras radiológicas del RB-01 establece dos zonas de acceso: la Zona de Acceso Libre (ZAL) y la Zona de Acceso Controlado (ZAC). El acceso a la ZAC se realiza exclusivamente a través de los Puestos de Control Sanitario, donde se efectúa el cambio de ropa y el control inicial de dosímetros.

Dentro de la ZAC, las salas se clasifican en tres categorías según su nivel radiológico y la permanencia del personal:

- ✓ Salas sin personal (zona de alto riesgo): El acceso solo se permite con el reactor parado, previa evaluación dosimétrica y autorización. Las esclusas sanitarias garantizan la barrera de contaminación.
- ✓ Salas de estancia periódica (área peligrosa): el personal puede ingresar con restricciones de tiempo determinadas por la situación radiológica medida.
- ✓ Salas de estancia permanente (área de posible riesgo): el personal puede permanecer durante el turno completo.

La Tabla 3 presenta los requisitos dosimétricos específicos por zona del RB-01:

Tabla 3: Zonificación radiológica del complejo del reactor RB-01.

Zona	Definición	Acceso
Zona de Acceso Libre (ZAL)	Fondo de radiación natural	Público general
ZAC – Estancia permanente	Personal puede permanecer turno completo	TOE autorizados
ZAC – Estancia periódica	Tiempo limitado según situación radiológica	TOE + control dosim.
ZAC – Sin acceso de personal	Prohibido acceso con reactor en potencia	Solo en parada + control dosim.

Para prevenir la propagación de contaminación radiactiva entre zonas de distinta clasificación, el edificio del reactor implementa un sistema de barreras al egreso de la ZAC. El sistema (marco detector) evalúa la superficie completa del cuerpo, incluyendo cabeza, costados, brazos y piernas, proporcionando alarmas acústicas y visuales cuando se superan los niveles de contaminación radiactiva establecidos.

Selección de dosímetros

El RB-01 especifica los siguientes sistemas dosimétricos para el monitoreo individual del TOE. La Tabla 4 integra estas prescripciones con las recomendaciones de la SSG-47 de la OIEA:

Tabla 4: Sistemas dosimétricos para el RB-01 e integración con SSG-47 (OIEA, 2018).

Dosímetro (RB-01)	Radiación medida	Zona / aplicación	Observación
TLD (termoluminiscente)	Radiación gamma	Todo el personal TOE (uso rutinario)	Dosímetro principal asignado individualmente
Dosímetro de lectura directa, gamma	Radiación gamma	Control operativo en trabajos de riesgo	Expedido antes del trabajo;

			verificado al finalizar
Dosímetro lectura directa, gamma+n	Gamma + neutrones	Zona de riesgo	Obligatorio en zonas de riesgo; complementa TLD rutinario
Eye/ Finger Ring (TLD)	Gamma (cristalino y piel)	Trabajos de alta exposición extremidades	Para trabajos con fuentes abiertas LRI

Protocolo de monitoreo periódico

Para el monitoreo de dosimetría individual del RB-01, se propone el siguiente protocolo:

- Frecuencia de lectura: mensual para todo el personal TOE. Los dosímetros TLD son expedidos y recogidos por el dosimetrista, con registro de firma del empleado.
- Dosímetro de control (testigo): cada lote incluye un dosímetro testigo que permanece fuera de la ZAC, permitiendo cuantificar y descontar la contribución de la radiación cósmica de fondo y la radiación natural terrestre.
- Dosimetría operativa: antes de cada trabajo de riesgo, se expide al ejecutor un dosímetro de lectura directa que es verificado inmediatamente al finalizar el trabajo.
- Lectura y análisis: los TLD son procesados en lector termoluminiscente. Los resultados se expresan en dosis equivalente Hp(10) y dosis equivalente superficial Hp(0.07). Para la piel de cristalino y manos se usa Hp(3) y Hp(0.07) local (dosímetros Eye/ Finger Ring).
- Niveles de referencia e investigación: se fijará el nivel de investigación para el TOE, para activar revisiones preventivas. Todo exceso debe ser analizado por el dosimetrista.
- Monitoreo de contaminación superficial.

Gestión de registros dosimétricos individuales

Los resultados del monitoreo individual se registran en tarjetas de registro de dosis de radiación individual. El empleado se familiariza anualmente con su dosis acumulada y lo consigna con su firma. En caso de traslado, se transfiere copia de la tarjeta al nuevo empleador, conservándose el original en el CIDTN.

Se propone la implementación de un sistema de gestión digital que incluya:

Base de datos electrónica con historial dosimétrico individual: dosis mensual, acumulada anual y total de vida laboral.

Alertas automáticas al dosimetrista cuando se supere el nivel de investigación o el nivel de acción (20 mSv/año).

Reporte mensual a la Autoridad Reguladora Nacional (AETN) de la dosimetría individual.

RESULTADOS DISCUSIÓN

El resultado central es una metodología de dosimetría personal estructurada en cuatro componentes para el RB-01, con los estándares ICRP 103 y GSR Part 3 y la normativa nacional. La Tabla 5 sintetiza la comparación con las prácticas de reactores de investigación de referencia en América Latina:

Tabla 6: Comparación entre reactores de investigación regionales y propuesta para el RB-01.

Aspecto	RA-6 (Argentina)	IEA-R1 (Brasil)	RB-01 – Propuesta (Bolivia)
Dosímetro principal	TLD	OSL + TLD	TLD
Control operativo	Dosímetro electrónico	Dosímetro electrónico	Dosímetros electrónicos (gamma+n)
Frecuencia lectura rutinaria	Mensual	Mensual	Mensual

Dosímetro testigo fondo	Sí	Sí	Sí + corrección específica por altitud (4.000 msnm)
Registro individual	Digital (SARA)	Digital (SIDI)	Digital (propuesto)

La ubicación del RB-01 a 4.000 msnm introduce un factor de corrección dosimétrica único en el contexto de los reactores de investigación mundiales. La tasa de dosis por radiación cósmica en La Paz/El Alto puede superar los 1,5–2,0 mSv/año, comparado con 0,3–0,6 mSv/año a nivel del mar. Sin un dosímetro testigo correctamente posicionado fuera de la ZAC, esta contribución sería atribuida erróneamente a la exposición ocupacional, distorsionando el registro histórico de dosis del personal.

CONCLUSIÓN

La dosimetría personal propuesta para el RB-01 articula la normativa nacional vigente y los estándares internacionales (del OIEA y normativa rusa). En este contexto, Las principales contribuciones sonse concluye lo siguiente:

La presente propuesta de dosimetría individual en el RB-01 (TLD, dosímetros de lectura directa, TLD Eye/ Finger Ring) integra un protocolo unificado que cubre tanto la dosimetría rutinaria como la operativa.

La zonificación radiológica del RB-01 comprende cuatro niveles, coherentes con el GSR Part 3.

Dada la altura de la instalación en El Alto, Bolivia, es indispensable utilizar un dosímetro testigo en el RB-01 que permita descontar la contribución de la radiación cósmica en la dosis del personal.

El sistema de registros dosimétricos individuales incluye historial dosimétrico individual, con alertas automáticas al dosimetrista y reporte a la AETN.

Como trabajo futuro, se propone la validación experimental mediante mediciones in situ y la definición de los niveles de referencia específicos para cada zona del RB-01 a partir de los datos reales del campo de radiación.

Referencias bibliográficas

- ICRP (2007). International Commission on Radiological Protection (ICRP). The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection. ICRP Publication 103. Ann ICRP. 2007;37(2–4):1–332.
- IAEA (GSR Part 3, 2014). International Atomic Energy Agency (IAEA). Radiation Protection and Safety of Radiation Sources: International Basic Safety Standards. General Safety Requirements Part 3. Vienna.
- International Atomic Energy Agency (IAEA). Occupational Radiation Protection. Specific Safety Guide No. SSG-47. Vienna: IAEA; 2018.
- IAEA (RS-G-1.2, 1999). Individual Monitoring for Internal Exposure of Workers. Safety Guide RS-G-1.2. Vienna: IAEA.
- ICRP (2012). Statement on tissue reactions / Early and late effects of radiation in normal tissues and organs. Publication 118. Annals of the ICRP 41(1-2).
- Attix FH (2024). Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry. Weinheim: Wiley-VCH; 2004.
- CNEA (2020). Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA). Programa de Dosimetría Personal del Reactor RA-6. San Carlos de Bariloche: CNEA; 2020.
- Ministerio de Justicia de Rusia. (2009). SanPiN 2.6.1.2523-09. Normas de Seguridad Radiológica NRB-99/2009. Ministerio de Justicia de Rusia.
- Ministerio de Justicia de Rusia. (2010). SP 2.6.1.2612-10. Reglas Sanitarias Básicas de Seguridad Radiológica OSPORB-99/2010 (con Enmienda N° 1, 2013).
- DS. 5290 (2024). Estado Plurinacional de Bolivia. Decreto Supremo N° 5290 Reglamento 1- de Seguridad y Protección Radiológica.

ESTABILIDAD TERMODINÁMICA Y DINÁMICA DE CÁSCARAS DELGADAS DE EINSTEIN-MAXWELL Y DE EINSTEIN-BORN-INFELD EXTREMALES EN (2+1) DIMENSIONES.

(Comunicación)

Lic. DARIO ALBERTO OLMOS CAYO

dolmosc@fcpn.edu.bo

Semblanza:

Dario A. Olmos Cayo es licenciado en Física por la Universidad Mayor de San Andrés. Participó activamente en la comunidad académica como auxiliar de docencia, colaborador del Planetario Max Schreier y miembro fundador y coordinador del Club Estudiantil de Física Teórica. Fue reconocido como mejor estudiante del ciclo formativo. En investigación, es autor de un artículo publicado en 2025 en "The European Physical Journal C" y asistió en dos ocasiones al evento "Journeys into Theoretical Physics". Sus intereses se centran en relatividad general, objetos compactos y teoría cuántica de campos topológica, con el objetivo de continuar estudios de posgrado.

Introducción

La relatividad general en $(2+1)$ dimensiones es una teoría que presenta importantes perspectivas en la actualidad. Esta empezó a tomar relevancia desde el trabajo de Deser, Jackiw y 't Hooft [1]. El modelo no exhibe un límite Newtoniano y no presenta grados de libertad de propagación, por lo que se creía que no resultaba ser de gran interés físico y no podía relacionarse con sistemas usuales en $(3+1)$ dimensiones. Sin embargo el

descubrimiento de una solución de agujero negro por parte de Bañados, Teitelboim y Zanelli (denominada como BTZ) [2,3] fue sorpresivo para la comunidad y motivó el estudio de la gravitación en estas dimensiones. Es importante notar que la solución de agujero negro forma parte de la fase final del colapso gravitacional de materia, proceso físico que también ocurre en el caso $(3+1)$-dimensional. Es así que es posible estudiar sistemas en $(2+1)$ dimensiones, los cuales mantienen importantes características físicas pero evitan complicaciones matemáticas. Por ejemplo, en el ámbito de la gravitación cuántica se realizaron importantes trabajos en los cuales se recurre a sistemas $(2+1)$-dimensionales [4-6].

Al estudiar sistemas físicos, diversas interacciones pueden ser acopladas al campo gravitacional. En particular, la interacción electromagnética resulta relevante en diversos fenómenos astrofísicos. Si bien la teoría electromagnética más conocida es la electrodinámica de Maxwell, existen teorías no lineales del electromagnetismo [7] que presentan modificaciones a algunas de las características presentes en la teoría usual. Una de estas teorías es la desarrollada entre 1933 y 1934 por Max Born y Leopold Infeld [8]. La electrodinámica de Maxwell presenta divergencias tanto para el campo eléctrico de la carga puntual evaluado en la posición de la misma, como para su auto-energía, por lo que la electrodinámica no lineal de Born-Infeld surge con la intención de corregir estas inconsistencias teóricas. En esta electrodinámica se propone la existencia de un valor de campo eléctrico máximo, denotado por b, en analogía con la existencia de un valor máximo para la velocidad de propagación (velocidad de la luz en el vacío) presente en la relatividad especial. La teoría de Born-Infeld en $(3+1)$ dimensiones está descrita por la densidad Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{b^2}{4\pi}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{F}{b^2} - \frac{G^2}{4b^4}}\right), \quad (1)$$

donde

$$F = \frac{1}{2}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\ , \text{ y} \quad G = \frac{1}{2}F_{\mu\nu}F^{*\mu\nu}\ , \quad (2)$$

son los dos invariantes escalares linealmente independientes construidos a partir del tensor de Faraday $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ y su dual $F^{*\mu\nu} = \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu\gamma\rho}F_{\gamma\rho}$, donde $\eta^{\mu\nu\gamma\rho}$ es el tensor de Levi-Civita. A pesar que las motivaciones iniciales para la propuesta de la teoría fueron abordadas por la electrodinámica cuántica y procesos de regularización bien conocidos, la teoría de Born-Infeld surge naturalmente como el límite de bajas energías en teoría de cuerdas [9] – lo cual no ocurre con la teoría de Maxwell – y se torna un caso de estudio interesante en física teórica.

La solución de agujero negro para la gravedad de Einstein con término cosmológico, en $(2+1)$ dimensiones, acoplada a la electrodinámica de Born-Infeld (la cual será denominada como BI-BTZ), fue obtenida por Cataldo y García en [10]. Vale la pena notar que en estas dimensiones (incluso para la electrodinámica de Maxwell), la constante cosmológica empleada es negativa, ya que es el único caso que admite una solución de agujero negro. Si bien la métrica de esta solución es regular en el origen, el análisis de los invariantes de curvatura revela divergencias, lo que evidencia que el espacio-tiempo posee una singularidad en $r = 0$. Por otro lado, se verifica que para ciertos valores de los parámetros, la solución consta de horizontes de eventos, los cuales son hipersuperficies que recubren la singularidad, y en las cuales el tensor métrico presenta una divergencia.

Uno de los aspectos más interesantes es el estudio de la termodinámica de objetos compactos. En particular, las leyes de la mecánica de agujeros negros [11,12] revelan una analogía profunda con la termodinámica clásica, especialmente tras el resultado de Hawking [13], quien mostró que los agujeros negros emiten radiación térmica con temperatura

$$k_B T_H = \frac{\hbar}{2\pi}\kappa_s, \quad (3)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, $\hbar$ la constante de Planck reducida y κ_s la gravedad superficial evaluada en el radio del horizonte de eventos. La solución BI-BTZ

permite obtener expresiones para esta temperatura [14], aunque no es posible expresar de forma explícita la masa y la carga en función de los radios de los horizontes debido a la presencia de ecuaciones trascendentales.

Si bien los agujeros negros son objetos compactos simples por su reducido número de parámetros, una comprensión más profunda de su termodinámica requiere una teoría cuántica de la gravitación. Otra clase de objetos compactos relevantes son las cáscaras delgadas, construidas mediante el procedimiento de *corte y pegado* a lo largo de una hipersuperficie. Estas permiten estudiar de manera sistemática la termodinámica de la materia y ofrecen una vía alternativa para comprender la termodinámica de los agujeros negros. Su estabilidad dinámica y termodinámica ha sido objeto de numerosos estudios en $(3+1)$ dimensiones [15-17] y también en $(2+1)$ [18-20]. En este último caso, las cáscaras corresponden a anillos circulares con la misma métrica externa que la solución de agujero negro. Es importante notar que los criterios de estabilidad mecánica y termodinámica son fundamentalmente diferentes. Así, una solución estable mecánicamente, puede no serlo termodinámicamente, y viceversa. El estudio de la estabilidad conjunta ha sido abordado para diversas soluciones en $(3+1)$ dimensiones [17,21,22], y se busca ampliar este estudio para cáscaras cargadas en $(2+1)$ dimensiones.

En el presente trabajo se pretende estudiar ambos criterios de estabilidad para una cáscara delgada en $(2+1)$ dimensiones, en el contexto de la teoría de Einstein-Born-Infeld, y obtener las regiones de estabilidad dinámica y termodinámica en el espacio de parámetros, pudiendo así evaluar si es posible tener una estabilidad más consolidada, es decir que cumpla ambos criterios, y definir cuáles son los parámetros que dan lugar a esta estabilidad.

A lo largo de este texto se utiliza una métrica principalmente negativa. En lo que sigue, los índices griegos toman valores de 0 a 2, y los índices latinos de 0 a 1. Se utilizan unidades geométricas, es decir $c = 1$, $G_3 = 1$, donde G_3 es la constante gravitacional en $(2 + 1)$ dimensiones.

2. Desarrollo teórico

Solución BTZ acoplada a la electrodinámica de Born-Infeld

Si bien la solución BI-BTZ es conocida, es importante garantizar que esta recupere la solución BTZ cargada en el límite de campos débiles, por lo tanto se halló la solución con estas características a partir de la densidad Lagrangiana de la teoría. En $(2 + 1)$ dimensiones y tomando todas las condiciones necesarias para la cáscara delgada se obtuvo el elemento de línea de la teoría,

$$ds^2 = f(r)\mathrm{d}t^2 - \frac{\mathrm{d}r^2}{f(r)} - r^2\mathrm{d}\Omega^2, \quad (4)$$

donde $f(r)$ es

$$f(r) = -m - r^2\Lambda + 2b^2r^2 - 2b^2r^2\,\Gamma + q^2\left(1 - 2\ln\left(\frac{r}{2r_0}(1+\Gamma)\right)\right), \quad (5)$$

Con $\Gamma \equiv \sqrt{1 + q^2/(r^2b^2)}$, m es la masa ADM y r_0 es el radio en el cual el potencial eléctrico (para la teoría de Maxwell) es cero, Λ es la constante cosmológica, b el parámetro de Born-Infeld, q la carga y $x^\mu = (t, r, \Omega)$ las coordenadas del espacio-tiempo. Se puede verificar que al tomar el límite $b \to \infty$, se obtiene $f(r) = -m - \Lambda r^2 - 2q^2\ln(r/r_0)$, que es la función correspondiente a la solución BTZ cargada (el caso de la teoría usual de Maxwell).

Construcción de la cáscara delgada

Se llevó a cabo el procedimiento de *corte y pegado* desarrollado en [23], en el cual se presenta una hipersuperficie como interfaz de una variedad diferencial externa e interna, entendiendo el término variedad como el utilizado en geometría diferencial. En el caso a considerar, la hipersuperficie Σ es un anillo delgado que rodea el origen y las variedades externas e internas se denominan con $\mathcal{M}_+$ y $\mathcal{M}_-$ respectivamente. De la misma forma, las cantidades correspondientes a dichas variedades se identifican con $+$ y $-$. La variedad interna es un espacio-tiempo Anti de Sitter (AdS), y la variedad externa es la dada por la solución hallada en la anterior sección. Tomando esto en consideración, además de considerar que el anillo de materia obedece un tensor energía-momento de un fluido perfecto se obtuvieron las ecuaciones dinámicas para la densidad de energía y la presión:

$$\lambda = \frac{1}{8\pi a}\left(\sqrt{f_-(a)+\dot{a}^2} - \sqrt{f_+(a)+\dot{a}^2}\right), \quad (6)$$

$$p = \frac{1}{8\pi}\left(\frac{\ddot{a}+\frac{f_+'(a)}{2}}{\sqrt{f_+(a)+\dot{a}^2}} - \frac{\ddot{a}+\frac{f_-'(a)}{2}}{\sqrt{f_-(a)+\dot{a}^2}}\right), \quad (7)$$

Donde a es el radio de la cáscara delgada, $f_-(a) = -\Lambda a^2$ y $f_+(a)$ viene dado por la Ec. (5) Con el fin de analizar la estabilidad es necesario considerar una configuración estática, por lo tanto se toma un radio constante $a = a_0$, de modo que $\dot{a} = 0$ y $\ddot{a} = 0$. Además, reemplazando la forma explícita de $f_-(a_0)$ y $f_+(a_0)$ se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\lambda_0 = \frac{1}{8\pi a_0}\left(\frac{a_0}{l} - \left(-2a_0^2 b^2 \Gamma_0 + a_0^2\left(2b^2 + \frac{1}{l^2}\right)\right.\right. \\ \left.\left. -2q^2 \ln\left(\frac{a_0(\Gamma_0+1)}{2l}\right) - m + q^2\right)^{1/2}\right), \quad (8)$$

$$p_0 = \frac{1}{8\pi}\left(-\frac{1}{l} + \frac{b^2\Gamma_0(a_0^2 - 2l^2q^2) + a_0^2b^2 + q^2}{a_0b^2(\Gamma_0 + 1)l^2}\right.$$
$$\left(-\Gamma_0^2\left(2a_0^2b^2\Gamma_0 + a_0^2\left(-2b^2 - \frac{1}{l^2}\right)\right.\right. \quad (9)$$
$$\left.\left.+2q^2\ln\left(\frac{a_0(\Gamma_0 + 1)}{2l}\right) + m - q^2\right)\right)^{-\frac{1}{2}}\Big),$$

donde $\Gamma_0 = \Gamma(a_0)$, además se adopta el radio AdS, denominado por l, el cual se define como $\Lambda = -\frac{1}{l^2}$, y se optó por asignar a r_0 el valor l, ya que es la longitud característica de la solución externa cuando el radio tiende a su límite asintótico, en este caso a un espacio-tiempo AdS.

Al anillo se le impusieron condiciones importantes para la validez física de la solución, entre ellas el cumplimiento de la ecuación de continuidad del fluido y la condición de energía débil, la cual implica que la densidad de energía debe ser no negativa para todo observador.

Para estudiar la estabilidad es útil emplear una ecuación de estado que relacione λ y p. Esta relación puede tener una forma genérica, sin embargo en este caso se opta por el estudio de una ecuación de estado lineal:

$$p = \kappa\lambda, \quad (10)$$

donde κ es una constante. Si el contenido de materia del anillo fuese conocido, sería posible determinar el valor de κ (siempre y cuando la materia admita una relación lineal entre λ y p).

Al explorar la ecuación de la densidad de energía, se debe garantizar que el término resultante de la raíz cuadrada sea positivo, esto se cumple si

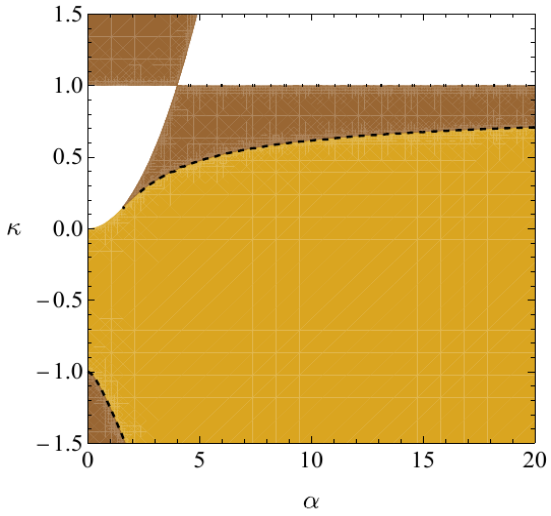
$$\frac{M}{a_0} < \frac{1}{4l}, \quad (11)$$

donde M es la masa del anillo, la cual se relaciona con la densidad de energía mediante $M = 2\pi a_0\lambda_0$. Esto indica que la densidad de energía debe tener una cota superior, que depende de manera inversamente proporcional al radio AdS, para que sea posible la

construcción del anillo a partir de las geometrías en consideración. Esta cota representa un límite interesante, ya que indica que dependiendo de parámetros de la teoría (el radio AdS) es posible hallar anillos con mayor densidad de energía.

Al momento de evaluar la estabilidad, es interesante tomar en cuenta las regiones en las que la solución externa presenta una estructura de espacio-tiempo con dos, uno (caso extremal) o ningún horizonte de eventos. La diferencia principal entre estas situaciones es que en el caso de existir horizontes, el radio de la cáscara delgada debe estar por fuera del horizonte de eventos externo. Al utilizar una parametrización adecuada, y evaluando las regiones en el plano (α, κ) (donde α es la razón carga-masa y κ la constante de la ecuación de estado) en las que la masa m es mayor o menor a la masa extremal m_{ex}, se obtienen las regiones en donde existen horizontes de eventos.

Figura 1: Regiones en las que se describe la estructura de horizontes de eventos de la solución externa en el caso de la electrodinámica de Maxwell. Las regiones color café describen la presencia de dos horizontes de eventos, las color mostaza su ausencia y las regiones blancas son aquellas para las cuales la masa es un número complejo, por lo que son descartadas del análisis. La interfaz entre las regiones café y mostaza representa el caso extremal (un único horizonte de eventos).



5. Resultados

Estabilidad dinámica

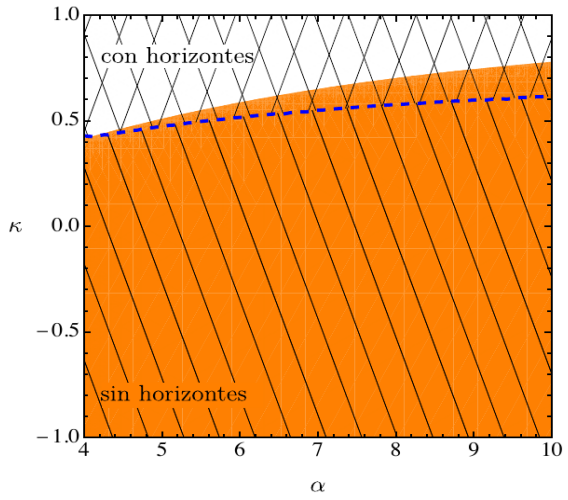
A partir de la Ec. (6) es posible obtener una expresión para el radio del anillo, la cual es análoga al caso de una partícula puntual en una dimensión:

$$\dot{a}^2 + V(a) = 0, \quad (12)$$

donde el potencial es:

$$V(a) = -\left(a^2\left(b^2(\Gamma-1) - \frac{1}{l^2}\right)\right) - (4\pi a\lambda)^2 - \frac{\left(b^2(\Gamma-1)\right)\left(-b^2\Gamma(\Gamma-1)a^2 + 2q^2\ln\left(\frac{(\Gamma+1)a}{2l}\right) + m\right)}{(8\pi\lambda)^2} - \frac{\left(m - q^2\left(1 - 2\log\left(\frac{(\Gamma+1)a}{2l}\right)\right)\right)^2}{(16\pi a\lambda)^2} - \frac{1}{2}\left(m - q^2\left(1 - 2\ln\left(\frac{(\Gamma+1)a}{2l}\right)\right)\right). \quad (13)$$

Figura 2: Región de estabilidad dinámica para el anillo en el límite de la electrodinámica de Maxwell. La región de estabilidad es representada de color naranja, mientras que la región con rectas cruzadas representa el caso de horizontes de eventos en la variedad externa y la región con rectas inclinadas el caso donde la variedad externa encierra un espacio-tiempo sin horizontes. La línea punteada corresponde al caso extremal. Se toman en cuenta únicamente las regiones que cumplan los requerimientos físicos para la densidad de energía y la condición de energía débil.

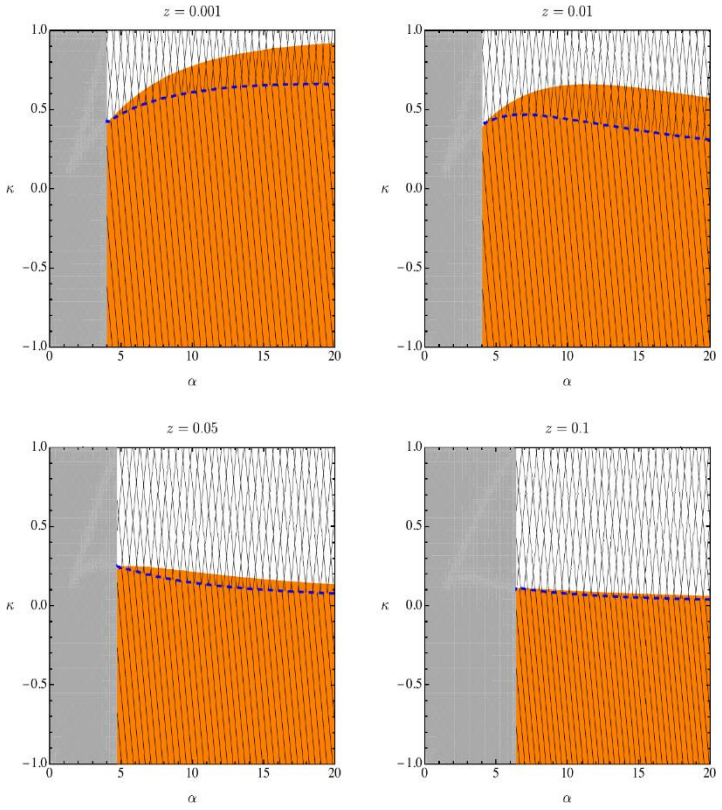


Para establecer la estabilidad dinámica, el potencial evaluado en el radio a_0 debe ser un mínimo, por lo tanto el equilibrio implica $V'(a_0) = 0$ y la estabilidad $V''(a_0) > 0$. Evaluar estas derivadas nos permite hallar las regiones de estabilidad en el plano (α, κ). El caso para la electrodinámica de Maxwell se muestra en la Figura 2. En la gráfica se puede evidenciar que la estabilidad es posible para una relación carga-masa $\alpha > 4$ y para $-1 < \kappa < 1$. Si bien no fue impuesta a priori, la cota superior de κ implica que este sistema cumple con la condición de energía dominante (es decir, que el flujo del tensor energía-momento no viaja a una velocidad mayor que la de la luz en el vacío). Por otra parte, se puede observar que la región en la que existen horizontes de eventos corresponde a una región de estabilidad más estrecha. Además se puede ver que cuando α incrementa, también lo hace la región de estabilidad, de manera que κ tiende asintóticamente a 1, lo que sugiere que una mayor relación carga-masa permite la posibilidad de configuraciones estables con presiones mayores.

El caso para la electrodinámica de Born-Infeld se muestra en la Figura 3. En ella se pueden ver cuatro gráficos, cada uno para un valor distinto de z, donde un mayor valor de z implica un mayor efecto de la teoría de Born-Infeld. Primeramente, se puede notar que cuando z es mayor, la cota inferior de α también es mayor, por lo tanto implica que, ante el efecto de la teoría de Born-Infeld, el anillo debe tener una relación carga-masa mayor para ser compatible con la geometría. Otro aspecto importante es que la región de

estabilidad es más estrecha cuando z crece, en particular se puede notar que los valores permitidos de κ tienen una cota superior con un valor cada vez menor (tendiendo a 0). Esto significa que las regiones de estabilidad son permitidas para valores pequeños de presión positiva (la presión, densidad de energía y κ se relacionan mediante la Ec. (10)). Esta observación es coherente con la teoría, ya que, cuando el efecto de Born-Infeld es más notorio, el campo eléctrico tiene un valor máximo b más pequeño, por lo que la densidad de energía y presión deben ir acorde a la disminución de b según las Ecs. (6) y (7), que en este caso implican un menor valor para la cota superior de κ.

Figura 3: Regiones de estabilidad dinámica para la solución de anillo cargado en la electrodinámica de Born-Infeld. Tanto la estructura de horizontes como las regiones de estabilidad cambian con el parámetro z, donde mayores valores de z implican un mayor efecto del parámetro de Born-Infeld. Las regiones por encima de la línea punteada azul corresponden a la presencia de horizontes de eventos, mientras que las regiones por debajo no cuentan con horizontes.



Estabilidad termodinámica

Para el estudio de la termodinámica se siguió el abordaje desarrollado en [24], el cual fue inicialmente empleado para sistemas autogravitantes por Martinez [25]. Se consideran como variables termodinámicas la masa del anillo M, el perímetro $A = 2\pi a$ y la carga q, los parámetros b y l se consideran parámetros definidos por la teoría, entonces no son tomados en cuenta como variables termodinámicas. Es de notar que se presupone que el sistema está en equilibrio mecánico, por lo que el radio a no es sometido a ninguna velocidad ni aceleración. Por lo tanto el anillo posee una temperatura $T(M, A, q)$ y una entropía $S(M, A, q)$. Definiendo $\beta = \frac{1}{T}$. Al evaluar la estabilidad termodinámica se utiliza la representación de entropía, por lo que una vez conocida la función $S(M, A, q)$ es posible obtener todas las características del sistema termodinámico. {

Para que el diferencial de entropía sea exacto, es necesario que se cumplan las condiciones de integrabilidad. Resolviendo estas condiciones y empleando los *ansätze* adecuados se hallaron las ecuaciones de estado para $\beta(M, A, q)$ y $\Phi(M, A, q)$, donde $\beta = \frac{1}{T}$ y Φ es el potencial electrostático termodinámico.

Para el caso de Maxwell se obtuvo la expresión para la entropía

$$S = \frac{\epsilon}{8} r_+, \quad (14)$$

donde ϵ es una constante y r_+ es el radio de horizonte de eventos externo. Esta entropía es coherente con la elección de los *ansätze*, ya que en $(3 + 1)$ dimensiones, partiendo de la temperatura de Hawking, se llega a una entropía proporcional al área del horizonte de eventos, por lo que en $(2 + 1)$ dimensiones tiene sentido que la entropía sea proporcional al radio del horizonte de eventos (por ende proporcional a su respectivo perímetro).

En el caso de Born-Infeld, en general no es posible obtener una expresión analítica para la entropía, y la obtención de una expresión numérica está fuera de los alcances de este

trabajo. Sin embargo sí es posible obtener una entropía para el particular caso de una cáscara extremal de Born-Infeld

$$S = -2^{2\delta-1}\gamma\, e^{\delta+1}(\delta+1)^{-\delta-2}\left(\frac{\omega^2}{\xi}\right)^{\delta+1}\left[(\delta+1)(ln(\xi)+2)\Gamma(\delta+1,\zeta)-2\Gamma(\delta+2,\zeta)\right], \quad (15)$$

donde $\Gamma(X,Y)$ es la función Gamma incompleta, $\omega = l\beta$, $r_l = r_{ex}/l$, $\xi = 1+4\omega^2$, $\zeta = (1+\delta)(1-2\ln[\frac{r_l\xi}{4\omega^2}])$, r_{ex} el radio extremal, γ y δ son parámetros utilizados en los *ansätze.*

Ahora, para que el anillo sea estable termodinámicamente, se considera que la entropía $S(M,A,Q)$ debe tener un valor mayor o igual que el valor de la función evaluada en un punto cercano. Esta relación implica que la entropía debe cumplir las siguientes desigualdades para que el sistema sea estable:

$$S_{AA} \leq 0, \quad (16)$$

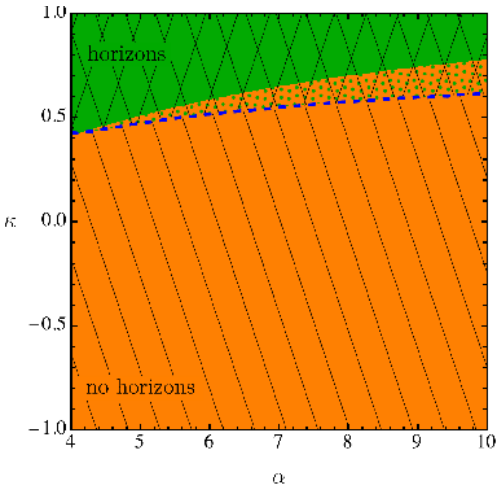
$$\alpha^2 S_{qq} + 2\alpha S_{Mq} + S_{MM} \leq 0, \quad (17)$$

$$S_{AA}\left(\alpha^2 S_{qq} + 2\alpha S_{Mq} + S_{MM}\right) - \left(\alpha S_{Aq} + S_{AM}\right)^2 \geq 0, \quad (18)$$

donde se emplea la notación en la que $S_X = \frac{\partial S}{\partial X}$.

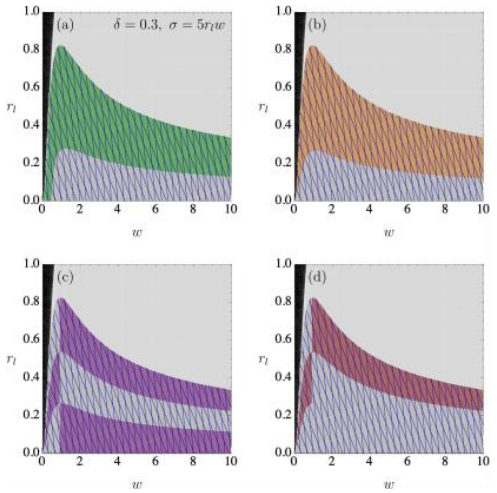
Es así que, al evaluar la entropía para el caso de Maxwell se halló la figura 4

Figura 4: Regiones de estabilidad termodinámica y dinámica para la cáscara delgada para el caso de Maxwell con una entropía tipo Hawking (regiones verde y naranja, respectivamente). Estas condiciones conducen a configuraciones en el espacio de parámetros que corresponden al cumplimiento simultáneo de ambos criterios de estabilidad (regiones naranjas punteadas), las cuales pueden considerarse más estables que aquellas en las que solo se satisface uno de los criterios de estabilidad.



Para el caso extremal de la electrodinámica de Born-Infeld se consideran los parámetros usados en la expresión para la entropía, es decir ω, r_l, δ (la estabilidad es independiente del parámetro γ), además es necesario tomar en cuenta un parámetro que involucre el parámetro de Born-Infeld, para ese propósito se introduce el parámetro $\sigma = a\beta$. En la figura 5 se muestra la región de estabilidad en el plano (ω, r_l) para valores específicos de δ y σ. Estos valores fueron variados para obtener más gráficos, pero en este caso se escogió uno de ellos para mostrar el comportamiento.

Figura 5. Regiones de estabilidad termodinámica para las condiciones: (a) $S_{AA} \leq 0$, (b) $\alpha^2 S_{qq} + 2\alpha S_{Mq} + S_{MM} \leq 0$, (c) $S_{AA}(S_{MM} + \alpha^2 S_{qq} + 2\alpha S_{Mq}) - (\alpha S_{Aq} + S_{AM})^2 \geq 0$ y (d) las tres condiciones se satisfacen simultáneamente. Se ha fijado $\delta = 0.3$ y $\sigma = 5r_l\omega$.



7. Conclusiones y perspectivas

Se realizó el estudio de una cáscara delgada en $(2+1)$ dimensiones, con el enfoque en la estabilidad dinámica y termodinámica. se inició por estudiar la solución BI-BTZ, a la cual se le asignó la constante de integración apropiada para que se recupere la solución BTZ cargada cuando $b \to \infty$, lo que permitió obtener una métrica apropiada con la cual trabajar. A partir de aquello se realizó el proceso de *corte y pegado*, con el cual se obtuvieron las ecuaciones de Lanczos. Por otro lado se trabajó con materia no exótica, por lo que se impuso la condición de energía débil.

La parametrización utilizada se caracterizó por una una relación lineal entre la carga y la masa del anillo $q = \alpha M$, además se empleó una ecuación de estado lineal. Para que la construcción de la cáscara sea compatible con la geometría de las variedades externa e interna se halló la importante restricción mostrada en la Ec. (11), con lo cual la densidad de energía tiene una cota superior dependiente del valor de la constante cosmológica. Por otro lado se obtuvieron las regiones características de la estructura de horizontes de la solución externa en la Figura 1.

Una vez realizado este análisis, se estudió la estabilidad dinámica del anillo. La región de estabilidad para el caso de Maxwell se presenta en la Figura 2. De esta gráfica se puede observar que las regiones de estabilidad se encuentran en el intervalo $-1 < \kappa < 1$, la cota inferior es la impuesta por la condición de energía, y la cota superior implica que, si bien no impuesta a priori, el sistema obedece la condición de energía dominante. Esto último está acorde con lo esperado, ya que si bien no ocurre en todos los casos, sí es usual que la condición de energía dominante sea satisfecha por este tipo de sistemas gravitatorios. De esta región de estabilidad se observa que a medida que el valor de α aumenta, es posible tener un anillo estable con una presión mayor (κ mayor). Las regiones de estabilidad para el caso de la electrodinámica de Born-Infeld se presentan en la Figura 3. En esta figura se puede observar que cuando z aumenta (es decir b disminuye y el efecto de la teoría de Born-Infeld es más notorio), las regiones de estabilidad admiten presiones con valores positivos cada vez menores (tendiendo a 0).

En ambos casos las regiones de estabilidad son más estrechas cuando la solución externa presenta horizontes de eventos.

En lo que respecta a la termodinámica, se estudió el caso de Maxwell, para el cual se propuso un *ansatz* tipo Hawking para el inverso de la temperatura. A partir de aquello se llegó a una entropía proporcional al radio de horizonte de eventos externo (y por ende proporcional al perímetro), lo que es coherente ya que en el caso $(3+1)$-dimensional para un agujero negro, la entropía es proporcional a la superficie del horizonte de eventos. A partir de aquello se utilizaron las desigualdades relacionadas a las condiciones de integrabilidad , con lo cual la región de estabilidad se presenta en la Figura 4. Se puede evidenciar que la región en la que se cumple la estabilidad dinámica y termodinámica es aquella donde se tiene estabilidad dinámica para el caso en el que la solución externa consta de dos horizontes de eventos, lo que tiene sentido, ya que la temperatura de Hawking se define sólo para el caso en el que existan estos horizontes. En el caso extremal para Born-Infeld se realizó el análisis para la entropía, las regiones de estabilidad se presentan en la figura 5 y la estabilidad dinámica es siempre satisfecha.

Como perspectiva futura se tiene el estudio de la estabilidad termodinámica del caso extremal para Born-Infeld, en el cual se deben explorar posibles soluciones a las incompatibilidades que surgen al momento de evaluar las desigualdades para la entropía. Por otro lado, sería interesante emplear técnicas numéricas para hallar las expresiones de los radios de horizonte de eventos en función de m y q, para estudiar el caso no extremal de Born-Infeld, sin embargo esto último sobrepasa los objetivos planteados para el presente trabajo.

Referencias bibliográficas

- [1] S. Deser, R. Jackiw, and G. 't Hooft, Three-dimensional Einstein gravity: Dynamics of flat space, Annals of Physics 152, 220 (1984).
- [2] M. Bañados, C. Teitelboim, and J. Zanelli, The Black Hole in Three Dimensional Space Time, Physical Review Letters 69, 1849 (1992).

- [3] M. Banados, M. Henneaux, C. Teitelboim, and J. Zanelli, Geometry of the 2+1 Black Hole, Physical Review D 48, 1506 (1993).
- [4] E. Witten, 2 + 1 dimensional gravity as an exactly soluble system, Nuclear Physics B 311, 46 (1988).
- [5] S. Carlip, Exact quantum scattering in 2 + 1 dimensional gravity, Nuclear Physics B 324, 106 (1989).
- [6] S. Carlip, Quantum gravity in 2 + 1 dimensions: The case of a closed universe, Living Reviews in Relativity 8, 1 (2005).
- [7] D. P. Sorokin, Introductory notes on non- linear electrodynamics and its applications, Fortschritte der Physik 70, 2200092 (2022), of a self-gravitating electrically charged thin shell and the black hole limit, Physical Review D 91, 104027 (2015).
- [8] M. Born and L. Infeld, Foundations of the new field theory, Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 144, 425 (1934).
- [9] E. Fradkin and A. Tseytlin, Non-linear electrodyna- mics from quantized strings, Physics Letters B 163, 123 (1985).
- [10] M. Cataldo and A. García, Three dimensional black ho- le coupled to the Born-Infeld electrodynamics, Physics Letters B 456, 28 (1999).
- [11] S. W. Hawking, Black holes in general relativity, Communications in Mathematical Physics 25, 152 (1972).
- [12] J. M. Bardeen, B. Carter, and S. W. Hawking, The four laws of black hole mechanics, Communications in Mathematical Physics 31, 161 (1973).
- [13] S. W. Hawking, Particle creation by black holes, Communications in Mathematical Physics 43, 199 (1975).
- [14] Y. S. Myung, Y.-W. Kim, and Y.-J. Park, Thermodynamics of Einstein-Born-Infeld black holes in three dimensions, Physical Review D 78, 044020 (2008).

- [15] J. P. Lemos, G. M. Quinta, and O. B. Zaslavskii, Entropy of a self-gravitating electrically charged thin shell and the black hole limit, Physical Review D 91, 104027 (2015).
- [16] J. P. Lemos, G. M. Quinta, and O. B. Zaslavskii, Entropy of an extremal electrically charged thin shell and the extremal black hole, Physics Letters B 750, 306 (2015).
- [17] E. F. Eiroa, G. Figueroa-Aguirre, M. L. Penñafiel, and S. E. P. Bergliaffa, Dynamical and thermodynamical stability of a charged thin-shell wormhole, The European Physical Journal C 84, 1160 (2024).
- [18] J. P. S. Lemos and G. m. c. M. Quinta, Thermodynamics, entropy, and stability of thin shells in 2+1 flat spacetimes, Phys. Rev. D 88, 067501 (2013).
- [19] J. P. S. Lemos and G. m. c. M. Quinta, Entropy of thin shells in a (2 + 1)-dimensional asymptotically AdS spacetime and the btz black hole limit, Physical Review D https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/prop.202200092.89, 084051 (2014).
- [20] E. F. Eiroa and C. Simeone, Charged shells in a (2 + 1)-dimensional spacetime, Physical Review D 87, 064041 (2013).
- [21] S. E. P. Bergliaffa, M. Chiapparini, and L. M. Reyes, Thermodynamical and dynamical stability of a self- gravitating uncharged thin shell, The European Physical Journal C 80, 719 (2020).
- [22] L. M. Reyes, M. Chiapparini, and S. E. P. Bergliaf- fa, Thermodynamical and dynamical stability of a self- gravitating charged thin shell, The European Physical Journal C 82, 151 (2022).
- [23] W. Israel, Singular hypersurfaces and thin shells in ge- neral relativity, Il Nuovo Cimento B (1965-1970) 44, 1 (1966).
- [24] H. B. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, 2nd Edition (1985).

- [25] E. A. Martinez, Fundamental thermodynamical equation of a self-gravitating system, Physical Review D 53, 7062 (1996).

PROPUESTA TÉCNICA DE CAPA DE AGUA CALIENTE PARA PROTECCIÓN RADIOLÓGICA EN REACTORES DE INVESTIGACIÓN TIPO PISCINA

(Comunicación)

Ing. HENRRY MAURICIO SUAREZ VARGAS

mauriciosuarez714@gmail.com

Semblanza:

Ingeniero Electromecánico con más de seis años de experiencia técnica en mantenimiento, supervisión de sistemas electromecánicos y gestión de equipos de trabajo. Actualmente desempeña funciones en la Unidad del Reactor Nuclear de la Agencia Boliviana de Energía Nuclear. Posee formación de posgrado en Ingeniería de Mantenimiento y Confiabilidad, así como especialización internacional en Tecnologías Nucleares y Operación de Reactores de Investigación, desarrollada en la Universidad Politécnica de Tomsk, Rusia. Cuenta además con capacitación en seguridad de reactores de investigación, cultura de seguridad nuclear, mantenimiento, automatización, instrumentación y gestión de proyectos

Introducción

Los reactores nucleares de investigación de tipo piscina son instalaciones utilizadas para la producción de radioisótopos, el análisis por activación neutrónica, la irradiación de materiales, la formación especializada y el desarrollo de aplicaciones nucleares, en los reactores nucleares de este tipo, el agua cumple simultáneamente las funciones de moderador, refrigerante y blindaje biológico vertical, por lo que su comportamiento

térmico, hidráulico y radiológico incide directamente en la confiabilidad operativa y la protección del personal.

Durante la operación del reactor, el agua puede contener productos de activación resultantes de la interacción neutrónica con agua, impurezas disueltas o materiales estructurales, bajo determinadas condiciones de mezcla convectiva; estos radionucleidos pueden desplazarse hacia la zona superior de la piscina, aumentando la tasa de dosis cerca de la superficie, especialmente durante tareas de operación, inspección, mantenimiento, manipulación de dispositivos experimentales, etc.

En este contexto, y bajo el principio ALARA, la capa de agua caliente se plantea como una alternativa auxiliar de ingeniería para reducir el transporte vertical de agua activada, mejorando la protección radiológica vertical, su fundamento consiste en aprovechar la diferencia de densidad entre el agua caliente y el agua fría para formar una barrera térmica en la zona superior de la piscina limitando el ascenso de agua activada hacia la superficie reduciendo la tasa de dosis sin reemplazar los sistemas existentes de seguridad, refrigeración, ventilación, purificación o control radiológico.

El presente trabajo tiene como objetivo desarrollar una propuesta técnica de capa de agua caliente para protección radiológica en reactores de investigación tipo piscina, incorporando un modelo de cálculo preliminar para evaluar su comportamiento radiológico, térmico e hidráulico.

METODOLOGÍA

El estudio se realizó con un enfoque analítico y técnico-documental, fundamentado en la transferencia de calor, la estratificación de fluidos, la protección radiológica, el transporte de radionúclidos, la hidráulica e hidroquímica de sistemas auxiliares que son aplicables a reactores nucleares de investigación tipo piscina.

El análisis se basa en el principio físico de la estratificación térmica, que establece que una capa superficial de agua con más temperatura y menos densidad en la parte superior de la piscina actúa como una barrera térmica; esta situación está vinculada a la protección radiológica, ya que obstaculiza el movimiento ascendente del agua activada hacia la superficie y ayuda a disminuir la tasa de dosis en dicha superficie.

El desarrollo metodológico considera tres enfoques principales: radiológico, termohidráulico e hidroquímico.

- El enfoque radiológico evalúa la reducción de la tasa de dosis mediante datos de referencia y factores de reducción.
- El enfoque termohidráulico permite analizar la potencia de calentamiento, velocidad de inyección, pérdidas hidráulicas y estabilidad de la capa caliente.
- El enfoque hidroquímico considera la calidad del agua, la conductividad eléctrica y la necesidad de purificación.

FUNDAMENTO FÍSICO DE LA CAPA DE AGUA CALIENTE

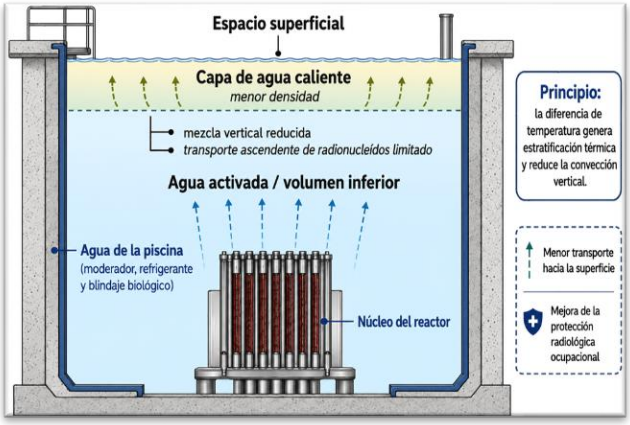
La base física de la capa de agua caliente radica en la variación de densidad del agua en función de la temperatura. Al mantener la parte superior de la piscina está más caliente una temperatura mayor, disminuye su densidad y se forma una capa térmica estable. Esta capa limita el transporte de agua activada hacia la superficie, lo cual es fundamental en reactores de piscina, ya que reduce la concentración de radionucleidos en la zona próxima a la superficie y, en consecuencia, disminuye la tasa de dosis.

Este principio está en concordancia con el criterio ALARA, buscando minimizar exposiciones ocupacionales. Sin embargo, no debe confundirse con un mecanismo de enfriamiento ni sustituir sistemas de seguridad o monitoreo.

La estabilidad de esta capa depende de varios factores, incluyendo la diferencia de temperatura y la velocidad de inyección. La inyección debe ser lenta y uniforme para

evitar la mezcla de capas. Adicionalmente, la conductividad eléctrica del agua debe ser controlada para mantener la calidad y seguridad del reactor, asegurando que la capa no interfiera con la circulación natural necesaria para la refrigeración del núcleo.

Figura 1: *Esquema conceptual del principio de estratificación térmica en una piscina de un reactor de investigación.*



Nota. La estratificación térmica representada busca ilustrar la reducción conceptual del transporte ascendente de agua activada hacia la región superficial del reactor

CRITERIOS DE DISEÑO CONCEPTUAL

Tabla 1: Criterios de diseño conceptual del sistema de capa de agua caliente

Criterio	Requisito técnico	Justificación
Protección radiológica	Reducir la tasa de dosis en la zona superior de la piscina.	El sistema busca limitar el transporte ascendente de agua activada hacia la superficie.
Estabilidad térmica	Mantener una capa superficial diferenciada respecto al volumen inferior.	La estratificación térmica es la base física del sistema WWL.

Criterio	Requisito técnico	Justificación
Baja turbulencia	Inyectar agua caliente con baja velocidad y distribución uniforme.	La turbulencia puede romper la capa caliente y reducir su efectividad.
Compatibilidad termohidráulica	No alterar la circulación natural ni la refrigeración del núcleo.	La capa caliente debe limitarse a la zona superficial del tanque.
Compatibilidad hidroquímica	Mantener pureza del agua y controlar conductividad eléctrica.	Las impurezas pueden favorecer corrosión, activación de contaminantes y deterioro radiológico.
Seguridad operacional	Incorporar alarmas, enclavamientos y parada segura.	Evita operación en condiciones anómalas de flujo, presión o temperatura.
Mantenibilidad	Permitir inspección, limpieza, calibración y reemplazo de componentes.	El sistema debe ser confiable y no convertirse en una fuente adicional de riesgo.
Gestión de cambios	Someter cualquier implementación a revisión formal.	Una aplicación real requiere evaluación técnica, institucional y regulatoria.

Nota. *Los criterios se formulan para una evaluación de prefactibilidad.*

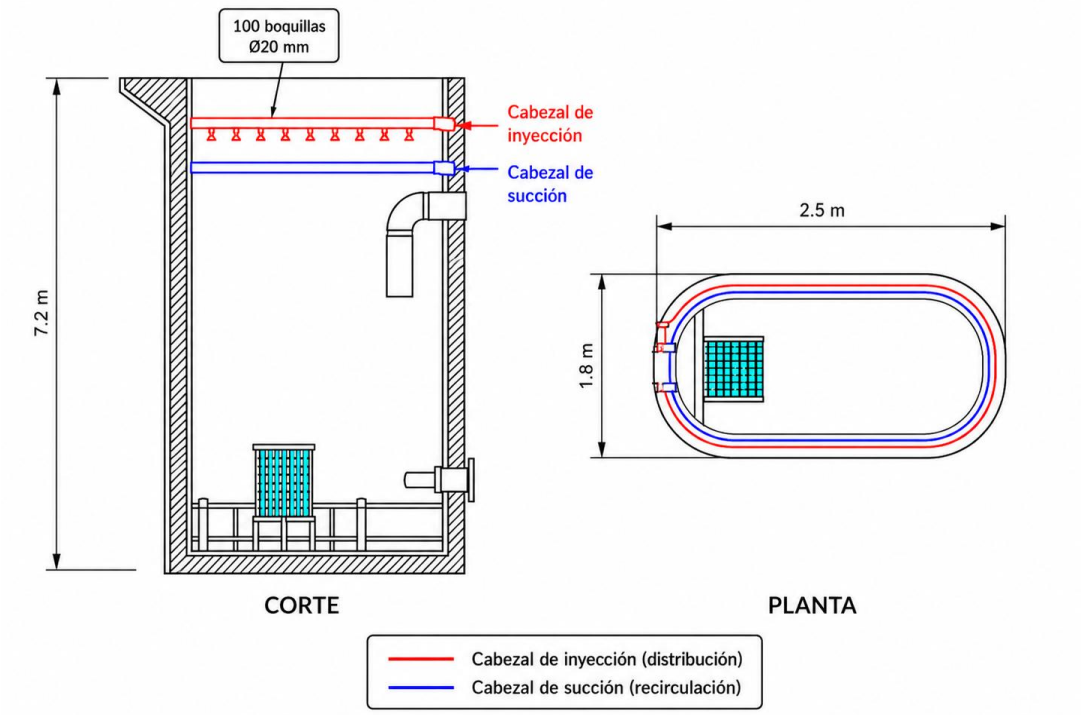
DATOS Y PARÁMETROS CONSIDERADOS PARA EL MODELO

Para que el modelado sea trazable, se definieron datos geométricos, funcionales, radiológicos, térmicos, hidráulicos e hidroquímicos.

Datos Geométricos de Referencia

Se emplearon dimensiones tomadas de la figura 2:

Figura 2: *Esquema de referencia de un Reactor de Investigación*



Nota. *Elaboración propia*

Tabla 2: Parámetros geométricos de referencia empleados en el modelo

Parámetro	Valor
Altura representativa del tanque	7,2 m
Ancho representativo	1,8 m
Dimensión longitudinal de referencia	2,5 m

Supuestos Iniciales para el Modelo del Sistema WWL

Los siguientes valores se consideran supuestos iniciales de modelado, derivados de una configuración de referencia del sistema WWL; su objetivo es alimentar los modelos matemáticos posteriores y permitir una evaluación de prefactibilidad.

Tabla 3: *parámetros de referencia para el modelado del sistema WWL*

Parámetro	Valor adoptado	Aplicación en el modelo
Caudal de recirculación	20 m^3/h	Hipótesis inicial para balance térmico e hidráulico.
Temperatura de entrada	35 °C	Condición inicial del agua recirculada.
Temperatura de salida	50 °C	Temperatura objetivo para formar la capa caliente.
Diferencia de temperatura	15 °C	Base para estimar potencia térmica.
Diámetro interno de tubería	DN80	Supuesto inicial para cálculo de velocidad.
Número de boquillas	100	Supuesto para distribuir el caudal.
Diámetro de boquilla	20 mm	Supuesto para estimar velocidad de inyección.
Espesor de capa caliente	0,7 m	Base para representación superficial.
Conductividad eléctrica objetivo	< 4 µS/cm	Referencia para control hidroquímico.

Nota. Los valores corresponden a supuestos iniciales y parámetros de referencia para el modelado preliminar.

Datos Radiológicos de Referencia

Para el enfoque radiológico se utiliza datos de referencia asociados a estudios de sistemas WWL en reactores de investigación tipo piscina, donde se comparan tasas de dosis gamma y de neutrones térmicos en condiciones sin WWL y con WWL, estos datos se emplean como base comparativa para evaluar el efecto radiológico potencial de la capa caliente.

Tabla 4: Datos radiológicos de referencia

Distancia desde el núcleo (cm)	Neutrones sin WWL (mSv/h)	Gamma sin WWL (mSv/h)	Neutrones con WWL (mSv/h)	Gamma con WWL (mSv/h)
50	8,64E+09	1,15E+13	8,64E+09	1,15E+13
100	4,37E+09	5,92E+09	4,37E+09	5,92E+09
150	6,50E+08	1,31E+09	6,50E+08	1,31E+09
200	1,26E+08	6,13E+08	1,26E+08	6,13E+08
250	1,49E+06	3,52E+08	1,49E+06	3,52E+08
300	3,37E+05	2,48E+07	3,37E+05	2,48E+07
350	3,35E+04	2,13E+07	3,35E+04	2,13E+07
400	2,99E+04	2,00E+06	2,99E+03	2,00E+06
450	2,98E+04	1,94E+06	1,98E-07	1,94E-03
500	8,49E+03	5,21E+05	5,49E-10	2,04E-06
550	7,37E+03	2,89E+05	3,49E-16	2,29E-10
600	5,15E+03	7,23E+04	1,36E-31	2,73E-15
650	4,99E+03	4,52E+04	1,94E-36	3,39E-18
700	4,68E+03	4,17E+04	0,00E+00	4,37E-20
750	3,26E+03	3,58E+04	0,00E+00	5,80E-25

Nota. *Los datos permiten la comparación de dosis con y sin el sistema de capa de agua caliente.*

Propiedades físicas consideradas

Las propiedades físicas del agua y los parámetros hidroquímicos son necesarios para los modelos térmico, hidráulicos, de estratificación e hidroquímico.

Tabla 5: Propiedades físicas e hidroquímicas consideradas para los modelos posteriores

Parámetro	Valor de referencia	Uso previsto
Densidad del agua	988 kg/m³	Caudal másico y potencia hidráulica.
Calor específico	4,18 kJ/kg·K	Cálculo de potencia térmica.
Conductividad térmica	0,64 W/m·K	Modelo de transferencia de calor.
Difusividad térmica	1,5×10−7 m²/s	Modelo de estratificación térmica.
Viscosidad cinemática	5,535×10−7 m²/s	Cálculo del número de Reynolds.
Longitud estimada de tubería	48 m	Estimación de pérdidas hidráulicas.

Nota. *Parámetros de referencia para los modelos termohidráulico e hidroquímico.*

Propiedades y parámetros hidroquímicos considerados

Los valores empleados corresponden a parámetros de referencia para evaluar el comportamiento hidroquímico del sistema.

Tabla 6: Parámetros de entrada para la representación hidroquímica

Parámetro	Valor adoptado	Unidad	Aplicación en el modelo
Tiempo total	72	h	Horizonte temporal del modelo.
Paso temporal	0,05	h	Resolución del cálculo.
Conductividad inicial	2,2	µS/cm	Condición inicial del agua.

Parámetro	Valor adoptado	Unidad	Aplicación en el modelo
Límite de conductividad adoptado	4,0	µS/cm	Criterio máximo de referencia.
Nivel de advertencia de conductividad	3,5	µS/cm	Umbral preventivo de control.
Conductividad objetivo	2,2	µS/cm	Valor hacia el cual tiende el sistema con purificación.
Inicio de acción de purificación	4,0	h	Tiempo desde el cual se considera efectiva la purificación.
Tasa de purificación	0,3	1/h	Intensidad conceptual de remoción de impurezas.
Presión diferencial inicial del filtro	8,0	kPa	Condición inicial del filtro.
Alarma de presión diferencial	45,0	kPa	Umbral preventivo de mantenimiento.
Bloqueo por presión diferencial	60,0	kPa	Condición de parada o bloqueo preventivo.
Capacidad inicial de resina/lecho mixto	100	%	Capacidad relativa inicial de purificación.
Advertencia de capacidad de resina	25	%	Umbral preventivo de recambio o regeneración.

Nota. *Los valores se adoptan con fines de modelado.*

MODELOS MATEMÁTICOS Y REPRESENTACIÓN

Para evaluar la viabilidad y el desempeño del sistema propuesto, se han desarrollado modelos matemáticos que abordan tres enfoques técnicos principales: radiológico, termohidráulico e hidroquímico. Cada modelo permite analizar aspectos específicos del comportamiento del sistema de capa de agua caliente en reactores tipo piscina

Modelo Radiológico

El modelo radiológico estima el impacto de la capa de agua caliente en la reducción de la tasa de dosis, comparando escenarios con y sin la estratificación térmica.

Modelo matemático para el análisis radiológico y tasa de dosis

La tasa de dosis total se calcula como la suma de las componentes gamma y neutrones térmicos: $\dot{H}_{total} = \dot{H}_{\gamma} + \dot{H}_{n}$ (1)

donde $\dot{H}_{\gamma}$ representa la tasa de dosis gamma y $\dot{H}_{n}$ la tasa de dosis por neutrones térmicos.

El factor de reducción radiológica se define como: $FR = \frac{\dot{H}_{\text{sin } WWL}}{\dot{H}_{\text{con } WWL}}$ (2)

Este factor indica cuántas veces disminuye la tasa de dosis al comparar la condición sin capa caliente con la condición con WWL.

Reducción en órdenes de magnitud mediante: $OR = log_{10}(FR)$ (3)

Así, $OR = 6$ equivale a una reducción de seis órdenes de magnitud, es decir, una disminución de un millón de veces respecto a la condición de referencia.

Modelo matemático de transporte relativo de radionucleidos

Para representar conceptualmente el transporte de radionucleidos hacia la superficie se considera una ecuación de advección-difusión:

$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} = D\nabla^2 C - \lambda C + S$ (4)

donde Ces la concentración relativa de radionucleidos, "u" y "v" son velocidades representativas del flujo, D es el coeficiente de mezcla efectiva, λ es la constante de decaimiento y S representa el término fuente.

Para efectos comparativos, la tasa de dosis superficial relativa se considera proporcional a la concentración relativa en la superficie: $\dot{H}_{rel} \propto C_S$ (5)

Esta relación permite vincular la disminución del transporte de radionucleidos hacia la superficie con la reducción de la tasa de dosis superficial.

Modelo Termohidráulico y de Estratificación

Este modelo permite dimensionar la potencia térmica y los parámetros hidráulicos necesarios para la formación y mantenimiento de la capa caliente, asegurando que no se generen velocidades excesivas ni perturbaciones.

Modelo matemático para el análisis hidráulico del circuito auxiliar

El segundo componente evalúa la velocidad del flujo, régimen hidráulico, pérdidas de presión y potencia de bombeo; la velocidad en tubería se calculó mediante:

$$v = \frac{Q}{A} \quad (6)$$

Para una tubería circular: $A = \frac{\pi D^2}{4}$ (7)

El régimen de flujo se evaluó con el número de Reynolds: $Re = \frac{vD}{\vartheta}$

Las pérdidas hidráulicas se estimaron como la suma de pérdidas por fricción y pérdidas locales:

$\Delta P_{total} = \Delta P_f + \Delta P_{local}$ (8); $\Delta P_f = f \frac{L}{D} \frac{\rho v^2}{2}$ (9); $\Delta P_{local} = K \frac{\rho v^2}{2}$ (10)

La altura manométrica equivalente se calculó mediante: $H = \frac{\Delta P_{total}}{\rho g}$

y la potencia hidráulica de la bomba mediante: $P_h = \rho g Q$ (11)

Modelo matemático de estratificación térmica

Para representar la formación de la capa caliente se empleó un modelo conceptual de evolución temporal; la temperatura superficial se modeló como una aproximación exponencial hacia la temperatura objetivo:

$$T_S(t) = T_b + (T_{obj} - T_b)(1 - e^{-t/\tau}) \quad (12)$$

donde $T_S(t)$ es la temperatura superficial, T_b es la temperatura del volumen inferior, T_{obj} es la temperatura objetivo de la capa caliente y τ es una constante temporal conceptual de estabilización.

La separación térmica vertical se representó mediante un perfil suavizado en profundidad, donde la zona superior tiende a la temperatura objetivo y el volumen inferior permanece próximo a la temperatura base; este modelo permite visualizar la formación progresiva de la capa caliente.

Para cuantificar la formación de la capa se definió un índice de estratificación:

$$I_E = \frac{T_S - T_b}{T_{obj} - T_b} \quad (13)$$

Donde $I_E = 0$ representa ausencia de capa caliente y $I_E = 1$ representa que la zona superficial alcanzó la temperatura objetivo adoptada.

Modelo Hidroquímico del sistema WWL

El modelo hidroquímico evalúa la influencia del sistema WWL sobre la calidad del agua. En reactores de investigación tipo piscina, la calidad del agua es un aspecto crítico porque la presencia de impurezas disueltas puede favorecer procesos de corrosión, activación de contaminantes, formación de productos no deseados y deterioro de la calidad radiológica del refrigerante, por ello, la conductividad eléctrica, expresada en µS/cm, se considera un parámetro hidroquímico fundamental para el control operacional.

El modelo hidroquímico propuesto evalúa tres escenarios: una condición estable, una condición sin purificación efectiva y una condición con purificación, además, incorpora

variables auxiliares asociadas al mantenimiento, como la presión diferencial en filtros y el agotamiento conceptual de la capacidad de resina.

Escenarios a ser considerados

El modelo considera tres escenarios hidroquímicos para comparar el comportamiento de la conductividad eléctrica y los indicadores de mantenimiento.

Tabla 7: Escenarios hidroquímicos considerados

Escenario	Descripción	Propósito del análisis
Condición estable	Representa una operación controlada, con bajo incremento de conductividad y sin deterioro significativo del filtro o resina.	Servir como referencia de comportamiento hidroquímico aceptable.
Sin purificación	Representa una condición en la que las impurezas aumentan progresivamente sin remoción efectiva.	Mostrar el riesgo de superar el límite de 4 µS/cm y evidenciar la necesidad de purificación.
Con purificación	Representa una condición donde el sistema de purificación reduce la acumulación de impurezas.	Evaluar el efecto del sistema de purificación sobre el control de conductividad y estabilidad operacional.

Nota. *Los escenarios son conceptuales y se emplean para comparar tendencias.*

Modelo matemático hidroquímico de conductividad eléctrica

La conductividad eléctrica se modeló como una variable dependiente del tiempo, afectada por una tasa de incremento de impurezas y, en el escenario con purificación, por un término de remoción. La condición general puede representarse de forma

simplificada como: $\frac{dk}{dt} = R_i - R_p(k - k_{obj})$ (14)

donde k es la conductividad eléctrica del agua, R_i representa la tasa conceptual de incremento de impurezas, R_p es la tasa de purificación y k_{obj} es la conductividad objetivo del sistema.

Para la condición sin purificación, la remoción se considera nula: $R_p = 0$

Por tanto, la conductividad tiende a aumentar progresivamente, en cambio, cuando existe purificación, el modelo considera una tendencia de retorno hacia la conductividad objetivo: $k \to k_{obj}$

La condición de compatibilidad hidroquímica se expresa mediante: $k \leq 4\ \mu\mathrm{S/cm}$

Modelo matemático de presión diferencial del filtro

La presión diferencial del filtro se incorpora como un indicador conceptual de mantenimiento. A medida que se acumulan partículas o impurezas, la resistencia al paso del flujo puede aumentar, elevando la presión diferencial.

El modelo simplificado considera: $\Delta P_f(t) = \Delta P_{f,0} + r_f t$ (15)

donde $\Delta P_f(t)$ es la presión diferencial en el tiempo, $= \Delta P_{f,0}$ es la presión diferencial inicial y $r_f t$ es la tasa conceptual de incremento.

Se consideran dos niveles de control:

$$\Delta P_f \geq \Delta P_{alarma}$$

$$\Delta P_f \geq \Delta P_{bloqueo}$$

El primer umbral representa una condición preventiva de mantenimiento, mientras que el segundo representa una condición que podría requerir bloqueo, parada o intervención del sistema.

Modelo matemático de capacidad de resina

La capacidad de purificación de una resina se representa de manera conceptual como una variable porcentual decreciente: $R(t) = R_0 - r_R t$ (16)

donde $R(t)$ es la capacidad relativa de purificación, R_0 es la capacidad inicial y $r_R t$ es la tasa conceptual de agotamiento.

Cuando la capacidad de resina disminuye por debajo de un umbral preventivo, se considera necesaria una acción de mantenimiento: $R(t) \geq R_{alarma}$

Este criterio permite vincular el modelo hidroquímico con la mantenibilidad del sistema, ya que un sistema WWL debe conservar la calidad del agua a lo largo del tiempo.

CONFIGURACIÓN DEL SISTEMA PROPUESTO

Con base en los criterios de diseño conceptual, los parámetros adoptados y los resultados preliminares de modelado radiológico, termohidráulico e hidroquímico, se plantea una configuración conceptual del sistema de capa de agua caliente como un circuito auxiliar de recirculación, su función principal es extraer agua desde una zona definida de la piscina, purificarla, calentarla y reinyectarla suavemente en la zona superior, con el fin de favorecer la formación de una capa térmica estable y reducir el transporte ascendente de agua activada hacia la superficie.

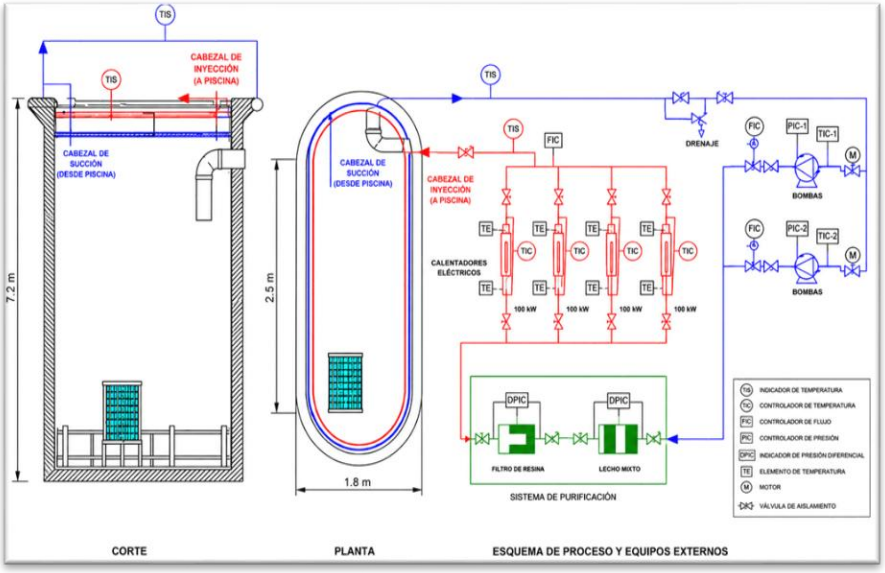
Tabla 8: Subsistemas principales de la configuración conceptual del sistema WWL

Subsistema	Función principal	Variable de control asociada
Cabezal de succión	Extraer agua de manera controlada desde la piscina.	Caudal de succión
Cabezal de inyección	Distribuir agua caliente con baja velocidad y mínima turbulencia.	Velocidad de inyección

Subsistema	Función principal	Variable de control asociada
Bomba de recirculación	Impulsar el agua a través del circuito auxiliar.	Caudal y presión
Sistema de purificación	Mantener la calidad hidroquímica del agua.	Conductividad eléctrica y presión diferencial
Sistema de calentamiento	Elevar la temperatura del agua recirculada.	Temperatura de salida
Instrumentación y control	Supervisar las condiciones de operación del sistema.	Temperatura, presión, caudal y conductividad
Enclavamientos de seguridad	Actuar ante condiciones anómalas de operación.	Bajo caudal, alta temperatura, alta conductividad o filtro saturado

Nota. *La tabla resume los subsistemas mínimos considerados para la configuración conceptual del sistema WWL y su relación con las variables principales de control*

Figura 3: Diagrama conceptual integral del sistema WWL.



Nota. *Elaboración propia*

RESULTADOS

FUNDAMENTO FÍSICO DE LA CAPA DE AGUA CALIENTE

Procedimiento de la Representación del Modelo Radiológico

Tabla 9: Procedimiento de representación radiológica implementado en Python

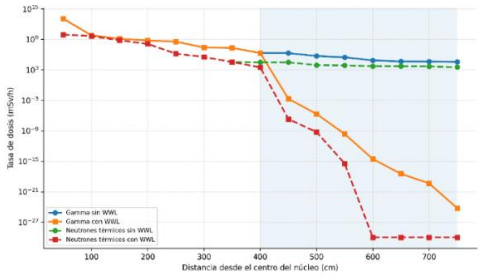
Paso	Operación realizada	Resultado obtenido
1	Ingreso de datos radiológicos de referencia.	Matrices de tasa de dosis gamma y neutrones con/sin WWL.
2	Cálculo de tasa de dosis total.	$\dot{H}_{total,\,\mathrm{sin}\,WWL}$ y $\dot{H}_{total,\,\mathrm{con}\,WWL}$
3	Cálculo del factor de reducción.	$FR = \dot{H}_{\mathrm{sin}\,WWL}/\dot{H}_{\mathrm{con}\,WWL}$
4	Cálculo de órdenes de magnitud.	$OR = log_{10}(FR)$
5	Se graficaron las tasas gamma y neutrónica con y sin WWL en escala logarítmica.	Perfil comparativo de tasa de dosis.
6	Se identificó la región donde el factor de reducción aumenta de forma significativa, principalmente en la zona superior del perfil.	Curva de reducción radiológica.
7	Se generó un mapa normalizado de intensidad concentración relativa para comparar el transporte hacia la superficie sin WWL y con WWL.	Mapa 2D que muestra la funcionalidad de la capa de agua

Nota. *La representación radiológica corresponde a un análisis comparativo.*

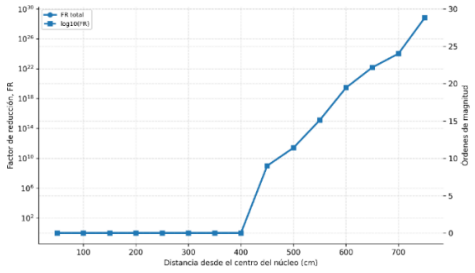
Interpretación de gráficos representativos

Tabla 10: Interpretación de técnica de representación implementada

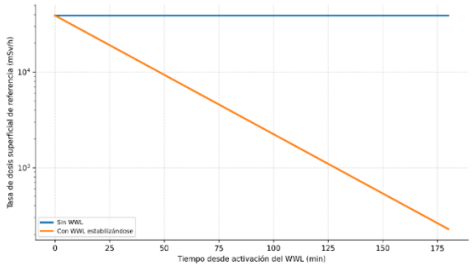
Representación



Comparativa de tasa de dosis con y sin WWL



Factor de reducción readiológica con WWL



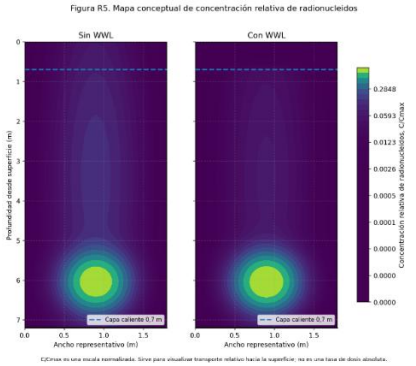
Reducción de tasa de dosis superficial

Interpretación

Hasta aproximadamente 400 cm, las curvas con y sin WWL son similares; a partir de la región sombreada, las tasas con WWL disminuyen bruscamente en varios órdenes de magnitud, evidenciando el efecto de la capa caliente como barrera al transporte ascendente de agua activada.

Hasta aproximadamente 400 cm la reducción es limitada, a partir de 450 cm, el FR aumenta, indicando que el WWL reduce significativamente la tasa de dosis total en la región superior, el eje logarítmico permite representar valores elevados de FR, mientras que $log_{10}(FR)$ facilita interpretar la disminución en órdenes de magnitud.

Muestra que, sin WWL, la tasa de dosis superficial de referencia se mantiene invariable, mientras que con WWL disminuye progresivamente conforme la capa caliente se estabiliza, esto representa el efecto gradual de la barrera térmica al limitar el transporte de agua activada hacia la superficie.

Representación	Interpretación
 Visualización de intensidad radiológica relativa con y sin WWL	Representa de forma normalizada la distribución relativa del transporte radiológico dentro del dominio modelado, en la condición sin WWL se observa una mayor propagación hacia la zona superior, mientras que con WWL la capa caliente de reduce la llegada relativa de actividad hacia la superficie, su finalidad es mostrar el efecto conceptual de barrera térmica generado por el WWL.

Nota. *Son conceptuales derivadas del modelo radiológico, los resultados se emplean para evaluar el efecto potencial del WWL.*

RESULTADOS DE LA REPRESENTACIÓN TERMOHIDRÁULICA Y DE ESTRATIFICACIÓN

Cálculo térmico

El primer componente del modelo estima la potencia térmica requerida para elevar la temperatura del caudal recirculado desde 35 °C hasta 50 °C; para ello se utilizó el balance térmico: $N = \dot{m} C_p \Delta T$ (17)

donde N es la potencia térmica requerida, $\dot{m}$ es el caudal másico, C_p es el calor específico del agua y ΔT es la diferencia de temperatura.

El caudal másico se calculó mediante: $\dot{m} = \rho Q$ (18)

Con los valores adoptados, el caudal másico resulta: $\dot{m} = 5{,}49\ kg/s$

Potencia térmica requerida para un salto térmico de 15 °C es: $N = 344{,}2\ kW$

Este resultado permite estimar el orden de magnitud de la potencia de calentamiento necesaria para formar la capa caliente bajo el caudal de referencia, ya que dependerá de

pérdidas térmicas, eficiencia de calentadores, condiciones reales de operación y límites de temperatura del reactor.

Resultados de diseño

Con el caudal adoptado de 20 m³/h, tubería DN80 y 100 boquillas de 20 mm, se obtuvieron los siguientes resultados preliminares.

Tabla 11: Resultados del diseño termohidráulico

Resultado calculado	Valor obtenido	Unidad	Interpretación técnica
Caudal másico	5,49	kg/s	Masa de agua recirculada por segundo.
Potencia térmica requerida	344,2	kW	Potencia necesaria para elevar el agua de 35 °C a 50 °C.
Velocidad en tubería DN80	0,986	m/s	Velocidad media en el circuito auxiliar.
Número de Reynolds	150917	—	Flujo turbulento en la tubería.
Factor de fricción Darcy	0,0165	—	Parámetro usado para estimar pérdidas por fricción.
Pérdida por fricción	4489	Pa	Pérdida estimada en tramo recto.
Pérdida local	13162	Pa	Pérdidas por accesorios, válvulas, filtros y conexiones.
Pérdida total de presión	17651	Pa	Carga total que debe vencer la bomba.
Altura manométrica equivalente	1,82	m.c.a.	Altura hidráulica preliminar del circuito.

Resultado calculado	Valor obtenido	Unidad	Interpretación técnica
Potencia hidráulica de bomba	98,1	W	Potencia mínima transferida al fluido.
Potencia de motor estimada	140,1	W	Potencia considerando eficiencia de bomba del 70 %.
Velocidad de inyección por boquilla	0,177	m/s	Velocidad baja, favorable para minimizar turbulencia.

Nota. *Los resultados dependen de los supuestos adoptados, la potencia térmica corresponde al calentamiento del caudal recirculado; la potencia de bombeo corresponde al requerimiento hidráulico estimado del circuito.*

Procedimiento de representación termohidráulica y de estratificación

Tabla 12: Representación termohidráulica y de estratificación implementado en Python

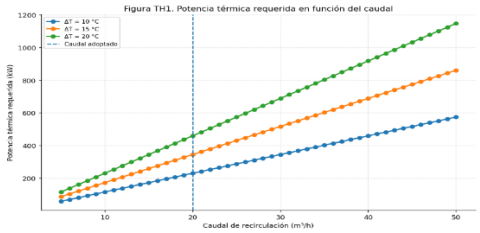
Paso	Operación realizada	Resultado obtenido
1	Ingreso de parámetros térmicos, hidráulicos y geométricos.	Condiciones iniciales del modelo.
2	Conversión del caudal de m³/h a m³/s.	Caudal en unidades del Sistema Internacional.
3	Cálculo del caudal másico.	$\dot{m} = \rho Q$
4	Cálculo de potencia térmica.	Potencia requerida para diferentes caudales y ΔT.
5	Cálculo de velocidad en tubería.	Velocidad media del circuito auxiliar.
6	Cálculo del número de Reynolds.	Identificación del régimen de flujo.

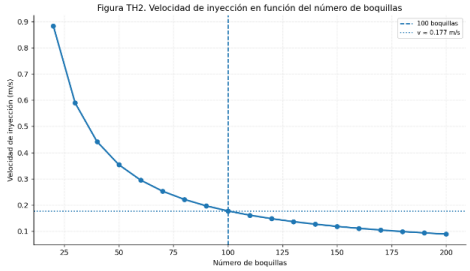
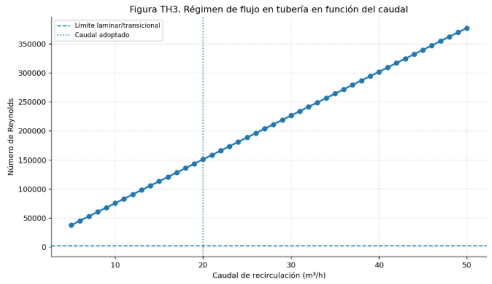
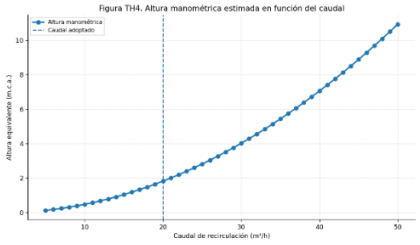
Paso	Operación realizada	Resultado obtenido
7	Cálculo de pérdidas hidráulicas.	Pérdidas por fricción, pérdidas locales y pérdida total.
8	Cálculo de potencia de bombeo.	Potencia hidráulica y potencia estimada del motor.
9	Cálculo de velocidad de inyección.	Verificación de baja velocidad por boquilla.
10	Modelo temporal de estratificación.	Evolución de temperatura superficial e índice de estratificación.
11	Generación de perfiles verticales.	Distribución de temperatura con la profundidad y visualización

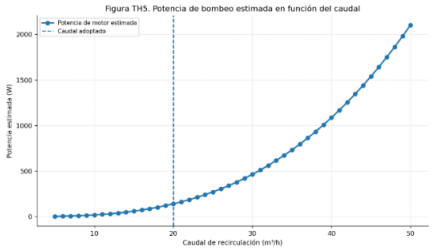
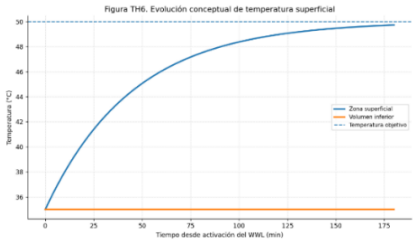
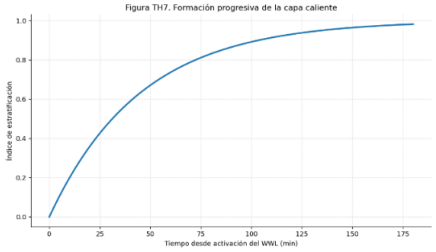
Nota. *representa un modelo preliminar de prefactibilidad.*

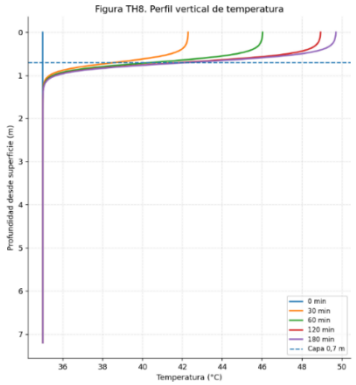
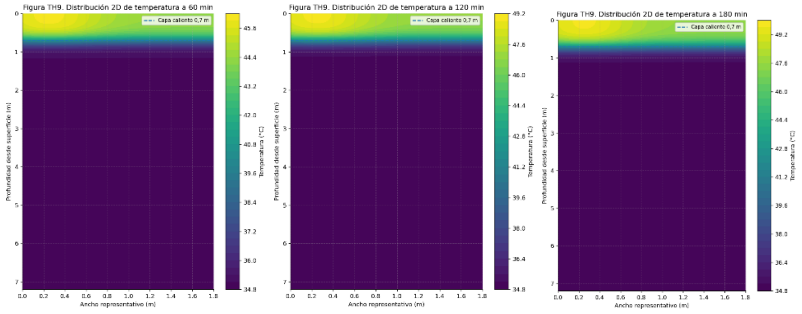
Interpretación de gráficos representativos

Tabla 13: Interpretación técnica de la representación termohidráulica y de estratificación

Representación	Interpretación
 Potencia térmica requerida en función del caudal	Permite identificar la demanda de calentamiento para distintos escenarios operativos, a mayor caudal o mayor diferencia de temperatura, aumenta directamente la potencia requerida.

Representación	Interpretación
 Velocidad de inyección en función del número de boquillas	Permite evaluar si la distribución del caudal mantiene velocidades bajas, un mayor número de boquillas reduce la velocidad de salida y favorece menor turbulencia en la zona superficial.
 Régimen de flujo en tubería en función del caudal	Permite identificar el régimen hidráulico en la tubería del circuito auxiliar, en el punto de diseño el flujo es turbulento, lo cual es esperable en tuberías, pero debe controlarse la inyección para evitar turbulencia en la piscina.
 Altura manométrica en función del caudal	Permite estimar la carga hidráulica que debe vencer la bomba considerando pérdidas por fricción y pérdidas locales.

Representación	Interpretación
 Potencia de bombeo estimada en función del caudal	Permite dimensionar preliminarmente el requerimiento de bombeo, la potencia hidráulica es baja frente a la potencia térmica, lo que indica que el mayor requerimiento energético corresponde al calentamiento.
 Evolución de la temperatura superficial	Representa la formación progresiva de la capa caliente, la zona superficial tiende a la temperatura objetivo, mientras que el volumen inferior se mantiene como referencia térmica.
 Formación progresiva de la capa caliente	Muestra el grado de formación de la capa caliente, valores cercanos a 1 indican que la capa superficial se aproxima a la condición térmica objetivo.

Representación	Interpretación
 Perfil vertical de temperatura	Permite visualizar la separación térmica entre la capa caliente superior y el volumen inferior. La línea punteada representa el espesor conceptual de la capa caliente.
 Distribución 2D de temperatura	Representa de forma visual la formación espacial de la capa caliente en el dominio simplificado. La figura permite observar la región superficial caliente y su transición hacia el volumen inferior.

RESULTADOS DE LA REPRESENTACIÓN HIDROQUÍMICA

Procedimiento de representación hidroquímica

Para cada escenario se calculó la evolución de conductividad eléctrica, presión diferencial del filtro y capacidad relativa de resina.

Tabla 14: Procedimiento de representación hidroquímica implementado en Python

Paso	Operación realizada	Resultado obtenido
1	Definición del horizonte temporal y paso de cálculo.	Serie temporal de 72 h.

Paso	Operación realizada	Resultado obtenido
2	Ingreso de conductividad inicial, límite de 4 µS/cm y nivel de advertencia de 3,5 µS/cm.	Condiciones hidroquímicas de referencia.
3	Definición de escenarios: estable, sin purificación y con purificación.	Comparación de tendencias operacionales.
4	Cálculo de evolución de conductividad eléctrica.	Curvas de $k(t)$ en µS/cm.
5	Cálculo del margen frente al límite de 4 µS/cm.	Identificación del margen operativo disponible.
6	Cálculo de presión diferencial del filtro.	Evaluación conceptual de saturación u obstrucción.
7	Cálculo de capacidad relativa de resina o lecho mixto.	Evaluación conceptual de agotamiento del medio de purificación.
8	Clasificación de estado operacional.	Condición normal, advertencia o fuera de límite.
9	Generación de gráficos representativos	Figuras HQ1 a HQ5

Nota. *La representación hidroquímica tiene como objetivo representar tendencias de control de calidad del agua.*

Resultados del modelo hidroquímico

Indicadores de cada escenario: conductividad final, tiempo en que se supera el nivel de advertencia, tiempo en que se supera el límite de 4 µS/cm, presión diferencial final, condición de filtro y capacidad final de resina.

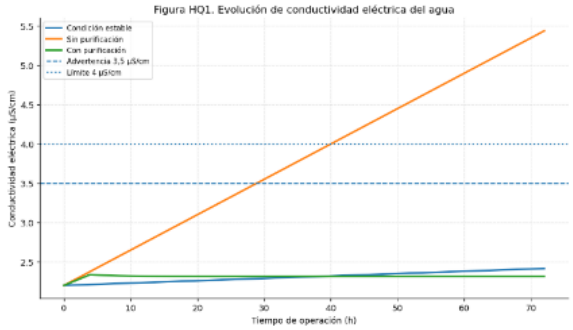
Tabla 15: Indicadores preliminares del modelo hidroquímica

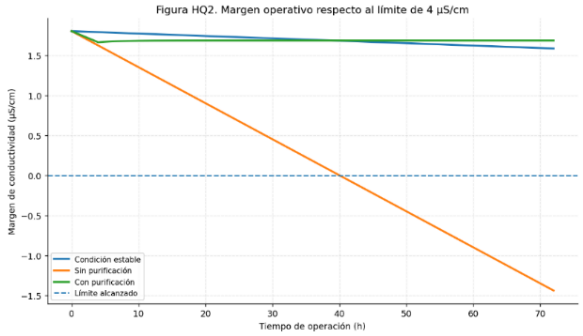
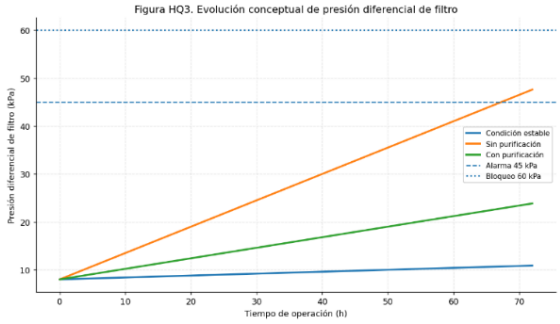
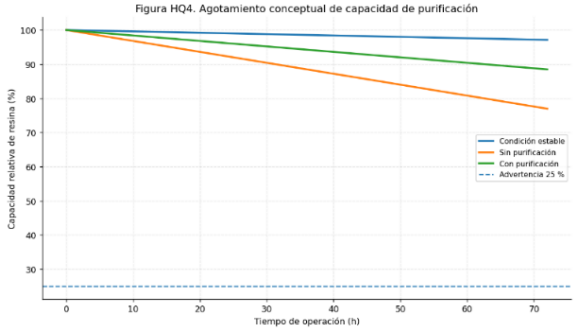
Indicador	Condición estable	Sin purificación	Con purificación
Conductividad final	2,416 µS/cm	5,440 µS/cm	2,317 µS/cm
Tiempo hasta advertencia de 3,5 µS/cm	No alcanza	28,9 h	No alcanza
Tiempo hasta límite de 4 µS/cm	No alcanza	40,0 h	No alcanza
Margen final respecto al límite	1,584 µS/cm	-1,440 µS/cm	1,683 µS/cm
Presión diferencial final	10,88 kPa	47,60 kPa	23,84 kPa
Tiempo hasta alarma de filtro	No alcanza	67,3 h	No alcanza
Capacidad final de resina	97,12 %	76,96 %	88,48 %
Tiempo hasta resina bajo 25 %	No alcanza	No alcanza	No alcanza

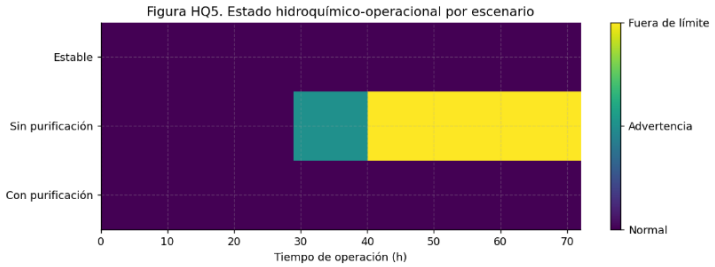
Nota. "No alcanza" indica que el umbral no fue superado dentro del tiempo considerado, el margen negativo indica que la conductividad supera el límite adoptado.

1.1.1. Interpretación de gráficos representativos

Tabla 16: Interpretación técnica del modelo hidroquímico

Representación	Interpretación
 Evolución de conductividad eléctrica del agua	Permite comparar si la calidad del agua se mantiene dentro del límite adoptado, la condición sin purificación tiende a superar el límite, mientras que la purificación controla la conductividad cerca del valor objetivo.

Representación	Interpretación
 Margen operativo respecto al límite de 4 µS/cm	Muestra cuánto margen queda antes de alcanzar el límite hidroquímico, cuando el margen se aproxima a cero, el sistema entra en una condición que requiere intervención preventiva o ajuste de purificación.
 Evolución de presión diferencial de filtros	Representa el posible aumento de resistencia al flujo por saturación u obstrucción del filtro, permite definir criterios de mantenimiento basados en advertencia y bloqueo por presión diferencial.
 Agotamiento de la capacidad de purificación	Muestra la disminución progresiva de la capacidad de purificación, permite identificar el momento en que sería necesario programar recambio, regeneración o inspección del medio de purificación.

Representación	Interpretación
 Estado hidroquímico	Permite dimensionar preliminarmente el requerimiento de bombeo, la potencia hidráulica es baja frente a la potencia térmica, lo que indica que el mayor requerimiento energético corresponde al calentamiento.

1.2. DISCUSIÓN TÉCNICA

La integración de los tres modelos muestra que el sistema WWL debe entenderse como un sistema auxiliar multidimensional, su beneficio radiológico depende de reducir el transporte de agua activada hacia la superficie; sin embargo, esta reducción solo es posible si la capa caliente se forma y se mantiene estable, por ello, el resultado radiológico está directamente vinculado con el comportamiento termohidráulico.

A su vez, la formación de la capa caliente requiere recirculación, calentamiento e inyección controlada, esto implica que el sistema debe operar con potencia térmica suficiente, baja velocidad de inyección y control de pérdidas hidráulicas, la estabilidad de la capa no depende únicamente de alcanzar una temperatura objetivo, sino también de evitar perturbaciones que generen mezcla vertical.

El análisis hidroquímico demuestra que la purificación es una función indispensable, la recirculación y el calentamiento del agua no deben deteriorar la pureza del refrigerante ni incrementar la conductividad fuera de los límites adoptados, por tanto, el sistema WWL debe integrar purificación, monitoreo de conductividad, presión diferencial de filtros y criterios de mantenimiento.

Con base en estos resultados, la configuración conceptual del sistema debe incluir cabezal de succión, bomba de recirculación, sistema de purificación, calentadores

eléctricos, cabezal de inyección, instrumentación, alarmas y enclavamientos, la Figura 3 presenta esta configuración integral, mostrando el flujo de succión/recirculación, calentamiento, purificación e inyección superficial.

ANÁLISIS DE APLICABILIDAD PRELIMINAR AL RB-01

El RB-01 es un reactor de investigación tipo piscina, con una potencia nominal de 200 kW, utiliza agua desmineralizada como moderador y refrigerante, y la refrigeración del núcleo se realiza principalmente por circulación natural dentro del tanque del reactor.
Aunque esta configuración permite considerar, de manera conceptual, el uso de una capa de agua caliente, su aplicación no puede asumirse de forma directa, el reactor cuenta con una vasija principal, vasija de seguridad, cubierta superior, plataforma de servicio, elementos internos, colectores, canales experimentales y sistemas auxiliares que deben ser respetados.
Por ello, la propuesta debe plantearse como una evaluación de prefactibilidad técnica, orientada a verificar si el sistema sería compatible con la geometría del tanque, la circulación natural, la protección radiológica, la calidad del agua, la operación del reactor y los requisitos regulatorios aplicables.

Estudios requeridos para prefactibilidad

Las principales limitaciones del estudio son el uso de datos radiológicos de referencia, la geometría, y la falta de datos operacionales específicos del RB-01, en consecuencia, se propone una metodología de prefactibilidad en diez etapas

Tabla 17: Etapas de análisis de prefactibilidad para el RB-01

Etapa	Estudios	Resultado esperado
1	Revisión geométrica del tanque, cubierta y plataforma	Determinar zona superficial disponible
2	Identificación de límites térmicos	Verificar temperaturas permitidas

Etapa	Estudios	Resultado esperado
3	Análisis de circulación natural	Confirmar no interferencia con refrigeración
4	Modelación preliminar	Evaluar estabilidad de la capa caliente
5	Evaluación radiológica	Estimar reducción potencial de dosis superficial
6	Revisión hidroquímica	Determinar compatibilidad con calidad del agua
7	Evaluación de ventilación	Analizar evaporación, humedad y gases
8	Análisis de interferencias	Revisar canales, plataforma, sensores y mantenimiento
9	Análisis de seguridad	Definir fallas, alarmas y enclavamientos
10	Gestión de cambios	Establecer ruta documental, institucional y regulatoria

Nota. *Las etapas propuestas constituyen una ruta preliminar de análisis de prefactibilidad para evaluar la posible aplicación del sistema WWL en el RB-01.*

CONCLUSIONES

- La capa de agua caliente representa una alternativa técnica conceptual practicable para mejorar la protección radiológica en reactores de investigación de tipo piscina, ya que utiliza la estratificación térmica del agua para restringir el ascenso de agua activada hasta la superficie.

- El modelo reveló que el impacto del sistema WWL se observa principalmente en la parte superior de la piscina, donde la tasa de dosis con WWL se reduce en varios órdenes de magnitud en comparación con la situación sin WWL.
- A través del análisis termohidráulico se pudo establecer que el desarrollo de la capa caliente se basa en el balance entre el caudal, la potencia térmica, la velocidad de inyección y la estabilidad de la estratificación. Bajo los supuestos considerados, se estima que el sistema necesita alrededor de 344,2 kW de potencia térmica y una velocidad de inyección de 0,177 m/s, un parámetro que resulta favorable para minimizar alteraciones en la zona superior.
- El estudio hidroquímico evidenció que la purificación es un elemento crucial del sistema WWL. Con el límite establecido de 4 µS/cm, el escenario sin sistema de purificación sobrepasa el valor permitido aproximadamente a las 40 horas, mientras que el escenario con purificación mantiene la conductividad dentro de los límites establecidos.
- La propuesta conceptual del sistema WWL se debe considerar como un sistema auxiliar interrelacionado, que incluye un cabezal de succión, una bomba de recirculación, un sistema de purificación, calentadores, un cabezal de inyección, instrumentación, alarmas y mecanismos de seguridad. Su operación segura depende de la incorporación de criterios radiológicos, termohidráulicos, hidroquímicos, operativos y de mantenimiento.
- En relación al RB-01, el uso de una capa de agua caliente se puede evaluar técnicamente como una hipótesis en ingeniería, pero no se puede asumir como su implementación de forma directa. Es necesaria una fase de prefactibilidad que examine la compatibilidad geométrica, la circulación natural, los límites térmicos, la calidad del agua, la ventilación, las interferencias con sistemas ya existentes, así como los requisitos de seguridad y regulatorios.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Al-Bataina, M. H., & Saeed, M. R. (2008). Thermal stratification in pool-type nuclear reactors and its impact on radiation safety. *Annals of Nuclear Energy, 35*(2), 123–129. https://doi.org/10.1016/j.anucene.2007.10.002
- Australian Nuclear Science and Technology Organisation (ANSTO), OPAL Reactor Safety Information, Available at: https://www.ansto.gov.au/opal
- International Atomic Energy Agency. (1994). *Safety in the design and operation of research reactors* (Safety Series No. 35-G1). International Atomic Energy Agency. https://www.iaea.org/publications/4475/safety-in-the-design-and-operation-of-research-reactors
- International Atomic Energy Agency. (2012). *Safety analysis for research reactors* (IAEA Safety Standards Series No. SSG-20). International Atomic Energy Agency. https://www.iaea.org/publications/8780/safety-analysis-for-research-reactors
- International Atomic Energy Agency. (2014). *Radiation protection and safety of radiation sources: International basic safety standards* (IAEA Safety Standards Series No. GSR Part 3). International Atomic Energy Agency. https://www.iaea.org/publications/8930/radiation-protection-and-safety-of-radiation-sources-international-basic-safety-standards
- McMichael, G. E. (1990). *Application of thermal stratification for radiation protection in pool reactors*. Proceedings of the International Conference on Research Reactor Utilization. https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:22050684
- Mirmohammadi, S. L., Gharib, M., Ebrahimzadeh, P., & Amrollahi, R. (2013). Design and installation of a hot water layer system at the Tehran research reactor. *Nuclear Technology and Radiation Protection,* 28(1), 18–24. https://doi.org/10.2298/NTRP1301018M

ENVENENAMIENTO POR XENÓN-135 Y SAMARIO-149 EN EL REACTOR NUCLEAR DE INVESTIGACIÓN BOLIVIANO RB-01 (PREDICCIONES PRE-OPERACIONALES)

(Comunicación)

M.Sc. JUAN FRANCISCO VALDEZ RODRIGUEZ

valdez.0018677@gmail.com

Semblanza:

Ing. Juan Francisco Valdez Rodríguez. Actualmente se desempeña en la Agencia Boliviana de Energía Nuclear (ABEN), Unidad de Reactores Nucleares (URN), participando en la preparación para la puesta en marcha y futura operación del reactor de investigación RB-01. Posee una Maestría en Física Nuclear y Tecnología (MEPhI, Rusia, 2021) y una Especialidad en Seguridad Nuclear (ARN, Argentina, 2023). Recientemente completó un reentrenamiento profesional en aplicación de tecnologías nucleares y de radiación en el funcionamiento de reactores de investigación (TPU, Rusia, 2025). Ha trabajado en control de instalaciones nucleares y radiológicas para la AETN de Bolivia y cuenta con amplia formación complementaria del OIEA.

Introducción

Los reactores nucleares de investigación desempeñan un papel fundamental en el desarrollo científico y tecnológico de numerosos países. Actualmente existen más de 220 reactores de investigación operativos en el mundo, utilizados en aplicaciones relacionadas con producción de radioisótopos, análisis por activación neutrónica,

neutrografía, difracción con neutrones, ciencia de materiales, formación de recursos humanos y desarrollo tecnológico.

En Bolivia, el Reactor Nuclear de Investigación RB-01 representa un hito estratégico para el fortalecimiento de las capacidades nacionales en tecnología nuclear. El reactor forma parte del Centro de Investigación y Desarrollo en Tecnología Nuclear (CIDTN) y permitirá desarrollar aplicaciones en medicina nuclear, irradiación, investigación científica y capacitación especializada.

Durante la operación de un reactor nuclear, se producen diversos productos de fisión que afectan el flujo neutrónico del núcleo. Entre los más importantes se encuentran el Xenón-135 y el Samario-149, conocidos como venenos neutrónicos debido a sus elevadas secciones eficaces de absorción neutrónica.

El Xenón-135 posee una sección eficaz de absorción térmica del orden de 2.65×10^6 barns, siendo considerado el veneno neutrónico de vida corta más importante en reactores térmicos. Su comportamiento dinámico influye directamente sobre la reactividad del reactor, especialmente durante cambios de potencia y períodos posteriores al apagado. Por otro lado, el Samario-149 posee una sección eficaz cercana a 4×10^4 barns y se caracteriza por acumularse progresivamente durante la operación del reactor, generando una pérdida de reactividad más estable y persistente.

Debido a que el RB-01 se encuentra en fase pre-operacional y aún no dispone de datos experimentales obtenidos durante operación real, resulta necesario desarrollar modelos predictivos iniciales que permitan aproximar el comportamiento neutrónico del núcleo bajo condiciones ideales y parámetros teóricos de diseño. En este contexto, el presente estudio constituye una primera etapa de análisis neutrónico orientada a evaluar,

mediante simulaciones computacionales, la evolución temporal del Xenón-135 y Samario-149 y su influencia sobre la reactividad del reactor RB-01.

Las simulaciones desarrolladas emplean parámetros teóricos y simplificaciones geométricas representativas del diseño neutrónico del reactor, por lo que los resultados obtenidos deben considerarse aproximaciones preliminares del comportamiento esperado del núcleo. Durante la futura etapa de puesta en marcha del RB-01 será posible obtener datos experimentales reales de flujo neutrónico, reactividad y comportamiento isotópico, los cuales permitirán validar, ajustar y desarrollar modelos neutrónicos más precisos para el análisis de los parámetros críticos de operación del reactor.

Metodología y Desarrollo Teórico

El comportamiento neutrónico de un reactor nuclear está fuertemente influenciado por la acumulación de productos de fisión con alta sección eficaz de absorción neutrónica, conocidos como venenos neutrónicos. Entre los más importantes se encuentran el Yodo-135 (I-135), el Xenón-135 (Xe-135) y el Samario-149 (Sm-149), debido a su capacidad de introducir reactividad negativa significativa en el núcleo del reactor. Estos radionúclidos afectan directamente la distribución de flujo neutrónico, la capacidad de control y la estabilidad operacional del reactor.

Producción y comportamiento del Yodo-135 y Xenón-135

El Xe-135 es considerado el veneno neutrónico más importante en reactores debido a su extremadamente elevada sección eficaz de absorción de neutrones térmicos, del orden de:

$$\sigma_{a,Xe135} \approx 2.6 \times 10^{6}\ barns$$

Esta característica convierte al Xe-135 en un absorbente muy eficiente de neutrones térmicos, provocando reducciones importantes de reactividad incluso en bajas concentraciones.

El Xe-135 se produce principalmente a través de la cadena de decaimiento de productos de fisión:

$$^{135}Te \rightarrow {}^{135}I \rightarrow {}^{135}Xe \rightarrow {}^{135}Cs$$

El telurio-135 posee una vida media muy corta y decae rápidamente a I-135, por lo que el yodo se convierte en el precursor dominante del xenón. El I-135 presenta una vida media aproximada de 6.6 horas, mientras que el Xe-135 posee una vida media cercana a 9.2 horas.

La evolución temporal de la concentración de I-135 depende de su producción por fisión y de su decaimiento radiactivo:

$$\frac{dI}{dt} = \gamma_I \Sigma_f \phi - \lambda_I$$

donde:

γ_I - es el rendimiento de fisión del I-135,

Σ_f - es la sección macroscópica de fisión,

ϕ - es el flujo neutrónico,

λ_I - es la constante de decaimiento del I-135.

La concentración de Xe-135 está determinada tanto por la producción directa e indirecta como por su destrucción debido al decaimiento y a la captura neutrónica:

$$\frac{dXe}{dt} = \gamma_{Xe} \Sigma_f \phi + \lambda_I I - \lambda_{Xe} Xe - \sigma_{a,Xe} \phi Xe$$

El término de captura neutrónica representa el "quemado" del Xe-135 dentro del reactor. Durante operación estacionaria, se establece un equilibrio dinámico entre producción y destrucción del xenón. Sin embargo, durante cambios de potencia o paradas del reactor, el comportamiento transitorio del Xe-135 puede generar fenómenos importantes de envenenamiento neutrónico.

Después de una parada del reactor, el flujo neutrónico disminuye abruptamente, reduciendo la quema de Xe-135; sin embargo, el I-135 continúa decayendo hacia Xe-135. Como resultado, la concentración de xenón aumenta temporalmente hasta alcanzar un

máximo varias horas después de la parada, fenómeno conocido como “pico de xenón”. Este comportamiento puede impedir el reinicio inmediato del reactor debido a la fuerte inserción de reactividad negativa.

En reactores de investigación de baja potencia, como el RB-01, el efecto del Xe-135 es menor que en reactores de potencia, pero sigue siendo relevante para los análisis de reactividad, procedimientos de arranque y predicciones neutrónicas pre-operacionales.

Producción y comportamiento del Samario-149

El Sm-149 constituye otro veneno neutrónico importante en reactores térmicos. A diferencia del Xe-135, el Sm-149 es estable y no desaparece por decaimiento radiactivo, sino únicamente mediante absorción neutrónica.

El Sm-149 se genera principalmente a partir de la cadena de decaimiento:

$$^{149}Nd \rightarrow {}^{149}Pm \rightarrow {}^{149}Sm$$

El precursor más importante es el Prometio-149 (Pm-149), el cual posee una vida media aproximada de 53 horas antes de transformarse en Sm-149. Debido a este proceso relativamente lento, la acumulación del samario ocurre gradualmente durante largos periodos de operación.

El comportamiento temporal del Pm-149 puede describirse mediante:

$$\frac{dPm}{dt} = \gamma_{Pm}\Sigma_f\phi - \lambda_{Pm}Pm$$

mientras que la concentración de Sm-149 evoluciona según:

$$\frac{dSm}{dt} = \lambda_{Pm}Pm - \sigma_{a,Sm}\phi Sm$$

El Sm-149 posee una sección eficaz de absorción térmica elevada, aproximadamente:

$$\sigma_{a,Sm149} \approx 4 \times 10^4\ barns$$

Aunque considerablemente menor que la del Xe-135, el Sm-149 representa un veneno de largo plazo debido a su naturaleza estable. Su acumulación produce una disminución

progresiva de la reactividad disponible a medida que aumenta el quemado del combustible.

A diferencia del Xe-135, cuya concentración disminuye después de una parada prolongada del reactor, el Sm-149 permanece acumulado incluso en ausencia de flujo neutrónico. Por esta razón, el samario tiene una influencia importante en el exceso de reactividad requerido para ciclos prolongados de operación.

Importancia en el análisis neutrónico del RB-01

En reactores de investigación como el RB-01, el análisis del envenenamiento neutrónico constituye una etapa esencial durante los estudios pre-operacionales y de puesta en marcha. La predicción de las concentraciones de I-135, Xe-135 y Sm-149 permite estimar variaciones de reactividad, márgenes de seguridad y condiciones de operación estable.

La simulación temporal de estos radionúclidos proporciona información relevante para:

- evaluación de la reactividad disponible;
- predicción de transitorios posteriores a arranques y paradas;
- análisis de estabilidad neutrónica;
- planificación de procedimientos operacionales;
- validación futura con datos experimentales obtenidos durante la puesta en marcha del reactor.

Los modelos matemáticos utilizados en este trabajo se basan en ecuaciones de balance isotópico dependientes del tiempo, resueltas mediante herramientas computacionales neutrónicas y complementadas con cálculos de transporte de neutrones y parámetros de quemado del combustible.

Herramientas de Simulación:

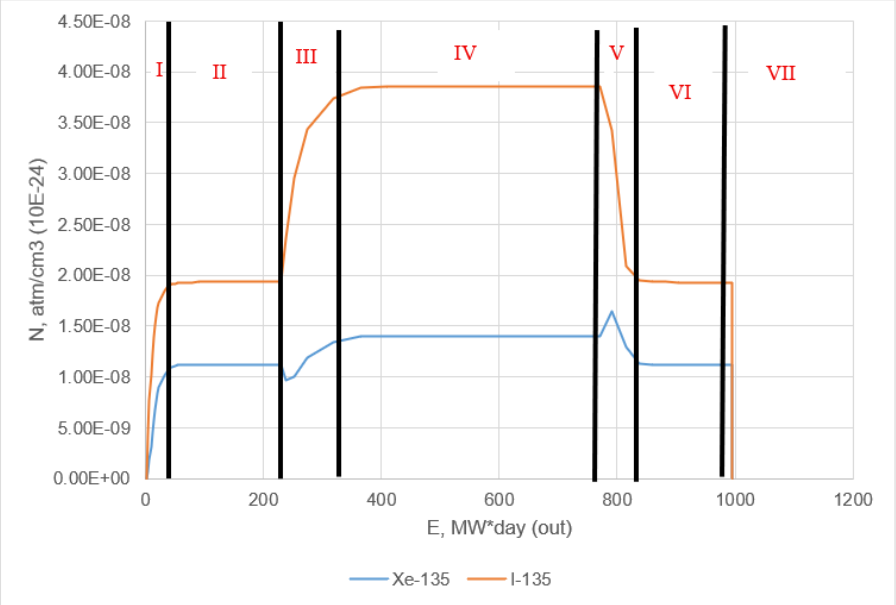
- **Código de Celdas WIMSD5B:** Modelo de celda unitaria del combustible (uranio 4,3 % ^{235}U, revestimiento de circonio, agua ligera) con 26 grupos de energía.

- **Hoja de Cálculo Dinámica:** Resuelve las ecuaciones de balance de ^{135}Xe y ^{149}Sm en pasos de tiempo discretos.
- **Software MCU5 (Montecarlo Universal):** Se incorpora esta herramienta de código Monte Carlo para realizar cálculos neutrónicos más detallados y tridimensionales del núcleo del RB-01. MCU5 permitirá refinar las secciones eficaces macroscópicas y validar los resultados obtenidos con WIMSD5B, constituyendo una base más sólida para las predicciones pre-operacionales.

Resultados:

A continuación se presenta el grafico 1 que refleja el comportamiento de los venenos de neutrones en la simulación del RB-01

Gráfico 1: Comportamiento del envenenamiento del reactor.



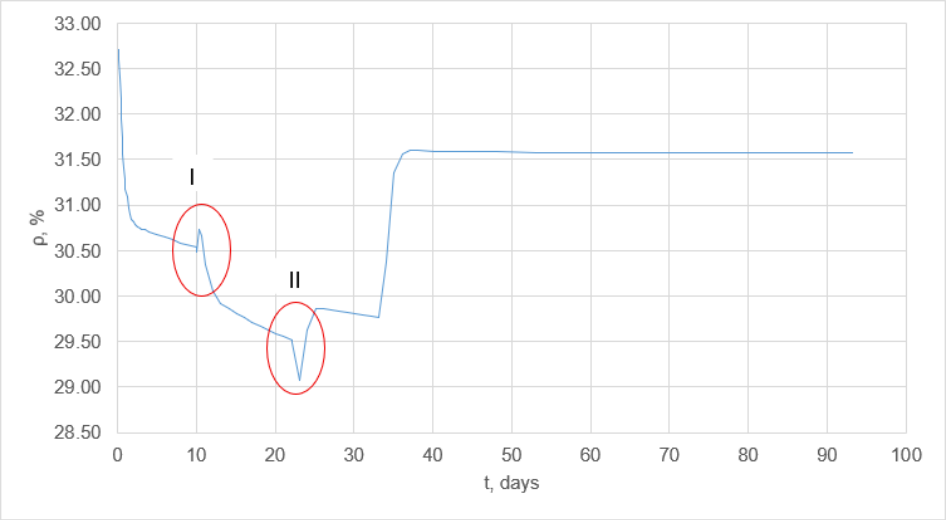
El gráfico muestra el comportamiento del envenenamiento por Xe-135 en el reactor en función de la energía liberada durante su funcionamiento.

Según el gráfico, podemos describir los siguientes aspectos a lo largo del tiempo de operación:

- En la Región I, el gráfico ilustra el comportamiento de las concentraciones de Xe-135 e I-135 al inicio de la operación del reactor. Esta región representa el envenenamiento transitorio del reactor. El gráfico muestra que, a medida que aumenta la potencia del reactor, la concentración de I-135 se incrementa, seguida de un aumento en la concentración de Xe-135. Esto se debe a que el Xe-135 se produce por la desintegración beta del I-135 y, en menor medida (con una probabilidad del 0,06%), directamente por la fisión del uranio.
- En las Regiones II, IV y VI, el gráfico ilustra el envenenamiento estacionario del reactor debido a la estabilización de la concentración de Xe-135. Según la teoría del envenenamiento del reactor, aproximadamente entre 40 y 50 horas después de la puesta en marcha, el reactor alcanza una concentración de equilibrio de Xe-135, que depende de la potencia del reactor, pero no sigue una relación lineal.
- En la Región III, el gráfico muestra una relación inversa entre las concentraciones de Xe-135 e I-135. Al aumentar la potencia del reactor, la concentración de I-135 se incrementa debido al aumento de la producción de fisión. Sin embargo, la concentración de Xe-135 disminuye porque absorbe neutrones y se transmuta en Xe-136 estable.
- En la Región V, el proceso se invierte con respecto a la Región III: a medida que disminuye la potencia del reactor, la concentración de Xe-135 aumenta debido a la desintegración beta del I-135 acumulado, mientras que la eliminación de Xe-135 por absorción de neutrones se reduce.
- En la Región VII, el gráfico muestra la evolución de la concentración de Xe-135 tras el apagado del reactor. La concentración alcanza su valor máximo aproximadamente 10 horas después del apagado (debido a la producción continua por la desintegración del I-135) antes de disminuir exponencialmente

con su vida media de 9,1 horas. Tras 80-90 horas, la concentración de Xe-135 se vuelve insignificante en el núcleo.

Gráfico 2: Comportamiento de la reactividad en el reactor.



El gráfico ilustra el comportamiento de la reactividad del reactor durante su operación, mostrando su respuesta a los efectos del envenenamiento por Xe-135 a lo largo del tiempo:

- Durante el arranque del reactor, la reactividad se mantiene inicialmente baja debido a la absorción de neutrones por el Xe-135 (efecto de envenenamiento por xenón).
- El pico I muestra un aumento de la reactividad a medida que disminuye la concentración de Xe-135 mediante la captura de neutrones y su posterior transmutación a Xe-136 estable.
- El pico II muestra una disminución de la reactividad a medida que aumenta la concentración de Xe-135 mediante la desintegración beta del I-135 y su posterior transmutación a Xe-135.
- Tras la parada del reactor, la reactividad permanece influenciada por la evolución temporal de los productos de fisión y los venenos neutrónicos presentes en el núcleo.

Los siguientes graficos muestran los resultados de la simulación con el programa MCU5

Tiempo, dias	K_{eff}, **relativo**	ρ_M, %
1	1.10096	9.17
1-10*	1.09423	8.61
11-12**	1.10537	9.53
212 – 2212***	1.07991	7.40

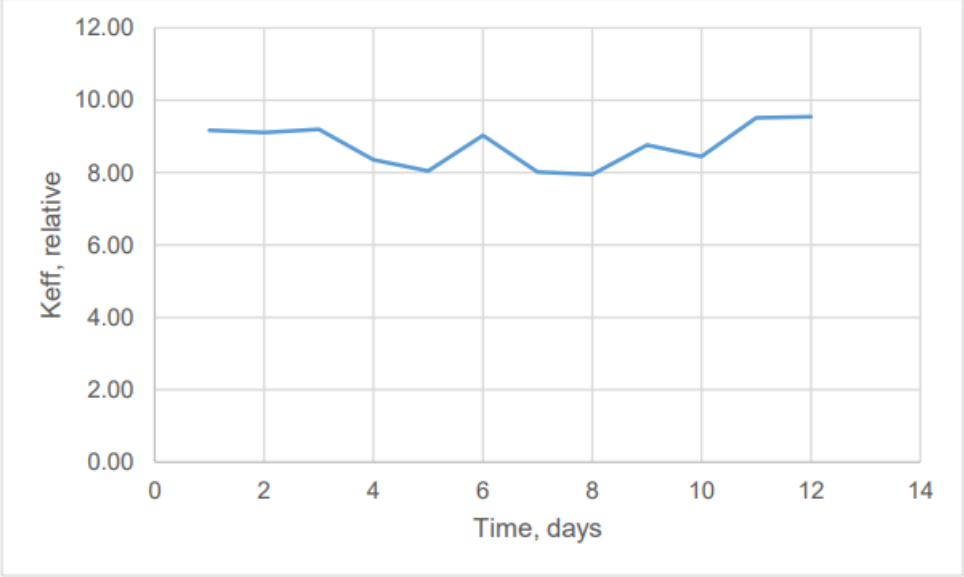
***** Durante este tiempo, el reactor operó a 200 kW.

****** Durante este tiempo, el reactor no operó (0 kW).

******* Durante este tiempo, el reactor operó a 200 kW.

El gráfico muestra el comportamiento del margen de reactividad en función del tiempo de operación del reactor, que consta de 3 periodos de operación:

Gráfico 3: Comportamiento del envenenamiento del reactor a los 12 días de operación.

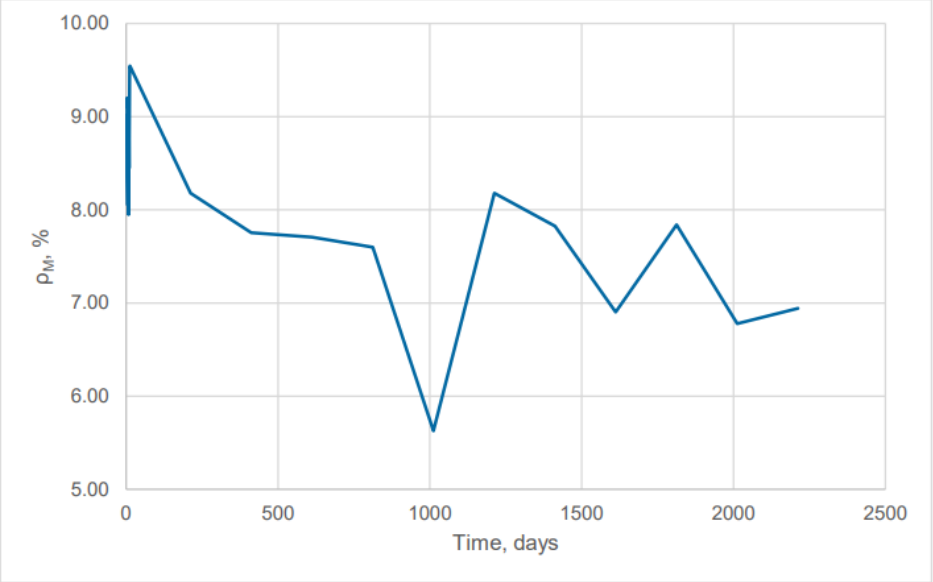


Durante el arranque del reactor, el margen de reactividad es del 9,17 %, lo que indica que la simulación del reactor operó cerca de sus condiciones de diseño (ρ_M = 9,81 %) durante este período. Por otro lado, durante los primeros 10 días (operación a 200 kW),

$\boldsymbol{\rho_M}$ promedió 8,61 %, ligeramente por debajo del valor de diseño (9,81 %), probablemente debido al quemado inicial del combustible y al envenenamiento por xenón, que absorbe neutrones reduciendo la tasa de reacción de fisión. Además, para este proyecto de simulación no se consideraron los canales experimentales del reactor.

El reactor no estuvo en funcionamiento durante los días 11 y 12; en este período se obtuvo un máximo del margen de reactividad del 9,53 %, ya que la concentración máxima de Xe-135 se alcanzó aproximadamente 9 horas después del apagado. Posteriormente al pico máximo de concentración de Xe-135, la reducción progresiva del xenón por decaimiento radiactivo produce una recuperación gradual de reactividad positiva en el núcleo.

Gráfico 4: Comportamiento del envenenamiento del reactor.



En el periodo comprendido entre los días 212 y 2212, el reactor operó a 200 kW.

Por ejemplo, para el día 1012, Keff había descendido a 1,060, con un margen de reactividad del 5,63 %, significativamente inferior al valor de diseño del 9,81 %. Este descenso a largo plazo se atribuye probablemente al agotamiento del combustible,

donde el consumo de material fisionable con el tiempo reduce la capacidad del reactor para mantener el mismo nivel de reactividad.

Los repuntes ocasionales, como el del día 1212 (Keff = 1,089, margen de reactividad = 8,18 %), podrían deberse a ajustes operativos o a la introducción de combustible nuevo o moderadores para compensar la pérdida de reactividad.

Reactividad (simulación WIMSD5B):

Tiempo (días)	k-infinito	Reactividad (Δk/k)
0	1.50336	+0.3348
10	1.45186	+0.3112
50	1.44529	+0.3081
200	1.40757	+0.2896
800	1.36972	+0.2699
1600	1.16965	+0.1450
2400	0.90908	-0.1000

Se observa una rápida disminución en los primeros 50 días (efecto del ^{135}Xe), estabilizándose hasta ~200 días, y luego un descenso más pronunciado debido al agotamiento del combustible y la acumulación de ^{149}Sm.

La simulación predice una penalización de reactividad por ^{135}Xe en equilibrio de ≈ -0.010, ligeramente superior al -0.0067 de los valores teoricos tipicos para Reactores. Esta

discrepancia es esperable en una etapa predictiva y será ajustada mediante la validación con datos experimentales futuros y el uso de MCU5.

Conclusiones:

El presente estudio constituye una primera aproximación teórica al análisis del envenenamiento neutrónico por productos de fisión en el reactor nuclear de investigación RB-01, desarrollado en el contexto de su fase pre-operacional y preparación para la puesta en marcha. A través de herramientas de simulación neutrónica y modelos de balance isotópico dependientes del tiempo, fue posible evaluar la evolución temporal del I-135, Xe-135 y Sm-149, así como su influencia sobre la reactividad del núcleo.

Los resultados obtenidos muestran que el I-135 actúa como precursor dominante del Xe-135, controlando en gran medida el comportamiento transitorio del envenenamiento por xenón. La simulación permitió verificar que, tras el arranque del reactor, la concentración de Xe-135 aumenta progresivamente hasta alcanzar condiciones cercanas al equilibrio aproximadamente entre 40 y 50 horas de operación continua, comportamiento consistente con la teoría neutrónica y con valores reportados en literatura especializada para reactores térmicos de investigación.

La simulación predice una penalización de reactividad asociada al Xe-135 en equilibrio del orden de $\approx -0.010\ \Delta k/k$, valor ligeramente superior al reportado en la teoria de reactores ($\approx -0.0067\ \Delta k/k$). Esta diferencia es razonable considerando el carácter preliminar del modelo, las simplificaciones geométricas adoptadas y el uso de parámetros neutrónicos teóricos representativos. En consecuencia, los resultados deben interpretarse como estimaciones iniciales del comportamiento esperado del núcleo durante futuras condiciones reales de operación.

Asimismo, el análisis temporal permitió identificar el fenómeno de "pico de xenón" posterior al apagado del reactor, observándose un incremento máximo de la concentración de Xe-135 aproximadamente entre 9 y 10 horas después de la parada. Este comportamiento confirma la importancia operativa del xenón en la planificación de arranques, reinicios y procedimientos operacionales, debido a la fuerte inserción temporal de reactividad negativa que puede dificultar el retorno inmediato a criticidad.

En relación con el Sm-149, las simulaciones evidencian una acumulación progresiva y sostenida durante la operación del reactor, debido a su naturaleza estable y a la ausencia de decaimiento radiactivo. La penalización de reactividad asociada al Sm-149 fue estimada en aproximadamente ≈ −0.005 Δk/k, mostrando un efecto más lento pero persistente sobre la reactividad disponible del núcleo. A diferencia del Xe-135, el samario permanece acumulado incluso después de la parada del reactor, convirtiéndose en un parámetro relevante para la evaluación del exceso de reactividad requerido en ciclos prolongados de operación.

El análisis neutrónico realizado mediante WIMSD5B y complementado con simulaciones preliminares en MCU5 permitió observar también la reducción gradual del margen de reactividad a lo largo del tiempo debido al agotamiento del combustible y la acumulación de venenos neutrónicos. Los resultados muestran coherencia física con los procesos esperados de quemado del combustible y comportamiento isotópico en reactores moderados y refrigerados por agua ligera.

Desde el punto de vista metodológico, el estudio demuestra que la combinación de cálculos determinísticos, balances isotópicos y simulaciones Monte Carlo constituye una herramienta adecuada para desarrollar predicciones neutrónicas pre-operacionales en reactores de investigación. Estas herramientas permiten anticipar parámetros importantes para seguridad y operación antes de la disponibilidad de datos experimentales reales.

Finalmente, se concluye que los resultados obtenidos representan una base inicial para futuros análisis neutrónicos del RB-01 y podrán ser refinados durante la etapa de puesta en marcha mediante la incorporación de datos experimentales reales de flujo neutrónico, reactividad y comportamiento isotópico del núcleo. La futura implementación de modelos tridimensionales detallados con el código MCU5 permitirá mejorar la precisión de las predicciones y fortalecer las capacidades nacionales de análisis neutrónico aplicadas a la operación segura del reactor nuclear de investigación RB-01.

Referencias bibliográficas

- Abagyan, L. P. (1964). Групповые константы для расчета ядерных реакторов [Group constants for nuclear reactor calculations]. Atomizdat. (Trabajo original publicado en ruso. Las constantes presentadas son la base del sistema BNAB).
- Agencia Boliviana de Energía Nuclear (ABEN). (2024). Informe Final de Análisis de Seguridad (FSAR) del Reactor Nuclear de Investigación RB-01. La Paz, Bolivia.
- Glasstone, S., & Sesonske, A. (1967). Nuclear reactor engineering. D. Van Nostrand Company.
- IAEA. (2023). Commissioning of Research Reactors. Safety Standards Series No. SSG-83. Vienna.
- IAEA. (2023). Operational Limits and Conditions and Operating Procedures for Research Reactors. SSG-84. Vienna.
- Krane, K. S. (1988). Introductory nuclear physics. John Wiley & Sons.
- Pakari, O., et al. (2025). "Towards the Direct Observation of Xenon-135 Poisoning in a Zero-Power Reactor via Gamma Spectroscopy". EPJ Web of Conferences, 302, 03003.
- Kępisty, G., et al. (2025). "Poisoning in a reactor stimulated by single group point reactor model and its experimental verification". Nuclear Engineering and Design, 421, 113050.

- MCU5 Team. (2023). MCU5 – Monte Carlo Universal Code for Neutron Transport. National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow.
- Oka, Y. (Ed.). (2014). Nuclear reactor design (An Advanced Course in Nuclear Engineering). Springer.
- Supathorn Phongikaroom (2024). Introduction to Nuclear Engineering. A safety Guide.
- U.S. Department of Energy. (1993). DOE fundamentals handbook: Nuclear physics and reactor theory (Vol. 2, DOE-HDBK-1019/2-93). Washington, D.C

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO EN TECNOLOGÍA NUCLEAR DE BOLIVIA: FASES DE CONSTRUCCIÓN Y PUESTA EN MARCHA DEL REACTOR DE INVESTIGACIÓN

(Comunicación)

M.Sc. ERLAN VASQUEZ VELASQUEZ

vasquez.erlan@gmail.com

Semblanza:

El Ing. Erlan Vasquez Velasquez es Licenciado en Ingeniería Petrolera (UAGRM) y Magíster en Física Nuclear y Tecnologías (Universidad MEPHI). Posee especialidades en aplicación de las tecnologías nucleares en la operación de reactores de investigación y seguridad radiológica (Universidad Politécnica de Tomsk). Actualmente, es Director de Aplicaciones de la Tecnología Nuclear en la Agencia Boliviana de Energía Nuclear. Tiene más de 5 años de experiencia especifica en el área nuclear, destacando su participación en el proceso de implementación del Reactor Nuclear de Investigación en el CIDTN. Es becario para operación de reactores y miembro de la Sociedad Boliviana de Ingenieros.

Introducción

La construcción del reactor de investigación se lleva a cabo en el marco del Acuerdo Intergubernamental de 6 de marzo de 2016 y de conformidad con el contrato general firmado en septiembre de 2017, con motivo de la 61.ª Conferencia General del OIEA

celebrada en Viena, para la construcción del Centro de Investigación y Desarrollo en Tecnología Nuclear en el Estado Plurinacional de Bolivia.

El CRDNT se divide en tres zonas:

- Zona administrativa
- Zona de producción
- Zona tecnológica

La zona tecnológica incluye el Complejo del Reactor, que está formado por el Reactor de Investigación (RR); los servicios y laboratorios relacionados con el RR, y el Complejo de Ingeniería y Tecnología, que es una instalación de gestión y almacenamiento de residuos radiactivos.

DESCRIPCIÓN GENERAL DEL REACTOR DE INVESTIGACIÓN

El reactor de investigación RB-01 es un reactor de agua ligera de tipo piscina, con una potencia de 200 kilovatios y una vida útil de 50 años, diseñado por ROSATOM (*Ahora el Pueblo, 2024*).

El objetivo principal del RR es apoyar diferentes ámbitos del desarrollo social y económico del país mediante la investigación científica, los servicios de producción de radioisótopos, el análisis por activación neutrónica y la formación de recursos humanos (*Agencia Boliviana de Energía Nuclear [ABEN], 2022*).

El RR utiliza un conjunto de combustible del tipo VVR-M2, con un enriquecimiento del 19,7 % en U-235, lo que cumple con la recomendación del OIEA en materia de no proliferación (*Mercopress, 2024*). El combustible VVR-M2 es un tipo de combustible de uranio poco enriquecido (LEU) que contiene dióxido de uranio disperso en una matriz de aluminio.

Tabla 1: Características técnicas del conjunto combustible VVR-M2 (Osipovich et al., 2012, p. 3)

Parámetro	VVR-M2
Altura de la sección de combustible, mm	600
Material del Combustible	UO_2-Al
Enriquecimiento en ^{235}U, %	19.7
Concentración de ^{235}U, g/cm^3	50
Concentración de U, g/cm^3	2.5
Revestimiento del combustible	SAV-1
Material estructural de las piezas de los extremos	SAV-6
Reactores de referencia	DRR (Vietnam), BRR (Hungary), VVR-M Kiev (Ukraine)

El RR está compuesto por un circuito primario de refrigeración (que incluye la vasija principal del reactor y los componentes internos de la misma), un intercambiador de calor y un circuito secundario de refrigeración. El sumidero final es el aire atmosférico.

Figura 1: Pruebas de fábrica de la vasija principal de RR



FASE DE CONSTRUCCIÓN DEL RR

La construcción del RR boliviano es llevada a cabo por el «Instituto Estatal de Diseño Especializado», una empresa de ROSATOM, que cuenta con un contrato de ejecución llave en mano, y se inició en julio de 2021. Se dividió en tres fases secuenciales: la fase de preparación, la fase de construcción y la fase de conclusión (*International Atomic Energy Agency [IAEA], 2024b*).

Durante el periodo de preparación se llevó a cabo la revisión del diseño y los trámites para la obtención de la licencia de construcción, y concluyó con el primer vertido de hormigón.

Durante la revisión del diseño se prestó especial atención a los principales medios para prevenir accidentes en la RR y mitigar las consecuencias de los mismos en caso de que se produjeran, aplicándose el concepto de defensa en profundidad.

De acuerdo con la normativa boliviana (*Asamblea Legislativa Plurinacional, 2019, Art. 27*). El proceso de autorización y el régimen de concesión de licencias comprenden las fases de licencia de emplazamiento, construcción, puesta en servicio, operación, cierre y desmantelamiento. Esto se ajusta a lo recomendado en la Norma de Seguridad SSR-3 del OIEA.

El período de construcción comienza con el primer vertido de hormigón y concluye cuando la instalación del reactor de investigación está lista para las pruebas de sistemas integrados (*IAEA, 2024b, p. 6*). En esta etapa se llevaron a cabo las actividades de adquisición, fabricación, construcción, montaje y pruebas del RR.

El control de calidad durante esta etapa fue realizado para garantizar que el proyecto se ejecutara de conformidad con las normas y requisitos establecidos, según el programa de aseguramiento de la calidad (QAP) aprobado.

La aceptación de las obras de construcción viene determinada por la emisión del certificado de aceptación de obras ocultas (HW) y del certificado de aceptación de obras de construcción/montaje completadas (CW), que están claramente definidos en el contrato.

En este momento, el período de construcción del RR está llegando a su fin, lo que significa que se está verificando toda la fabricación y el montaje de los sistemas, lo que da como resultado un sistema listo para su puesta en servicio.

INTERFAZ ENTRE LAS FASES DE CONSTRUCCIÓN Y PUESTA EN MARCHA

Esta interfaz puede entenderse como la relación entre las actividades previas y posteriores a la construcción; conviene tener en cuenta que habrá actividades de construcción que aún estarán en curso.

Esta etapa es importante porque durante este periodo deben producirse los traspasos de responsabilidad, y el reactor entra en la primera fase en la que funciona como una instalación integrada (*IAEA, 2024b, p. 6*). Durante este periodo debe hacerse especial hincapié en la interacción entre el grupo de construcción y el grupo de puesta en servicio. La aceptación de los trabajos de construcción y montaje para la puesta en servicio se logra cuando se emite el acta (HW y CW) de transferencia de los equipos instalados para la puesta en servicio del sistema.

ORGANIZACIÓN DE LOS TRABAJOS DE PUESTA EN MARCHA DEL RR

La organización, planificación y ejecución de la puesta en marcha del RR comprende las siguientes fases:

Fase A. Programa de trabajos previos a la puesta en marcha

- Subfase A0. Trabajos previos a la puesta en marcha.
- Subfase A1. Pruebas de funcionamiento de equipos y sistemas.
- Subfase A2. Pruebas de estanqueidad del edificio del complejo del reactor.
- Subfase A3. Pruebas de estanqueidad del circuito primario y control de calidad del refrigerante primario del reactor de investigación.
- Subfase A4. Revisión de los equipos principales.

Fase B. Programa de puesta en marcha física

- Subfase B0. Recepción y almacenamiento del combustible nuclear.

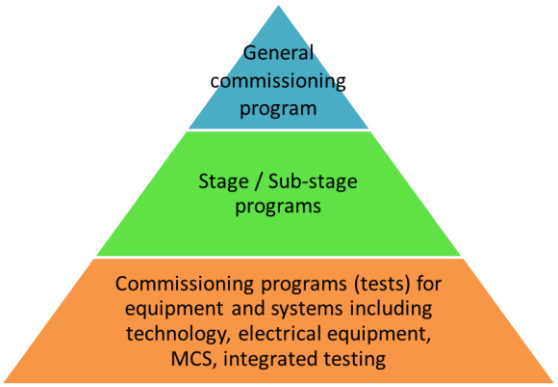
- Subfase B1. Carga de combustible y pruebas subcríticas.
- Subfase B2. Pruebas de criticidad inicial y de baja potencia.

Fase C. Programa de operación de prueba

- Programas de pruebas de garantía

La organización de los trabajos de puesta en servicio se basa en las recomendaciones del OIEA SGS-80 «Puesta en servicio de reactores de investigación».

Figura 2: Organización de las fases de puesta en servicio del RR



La organización, coordinación y supervisión de los trabajos de puesta en servicio se llevan a cabo a través de una estructura temporal denominada «Grupo de Gestión de la Puesta en Servicio (CMG)», integrada principalmente por representantes del propietario (ABEN) y del contratista (GSPI - Instituto Estatal de Diseño Especializado).

MISIÓN INSARR DEL OIEA

En febrero del presente año se llevó a cabo una misión del Programa de Evaluación Integrada de la Seguridad de los Reactores de Investigación (INSARR) del OIEA en el reactor de investigación boliviano, con el fin de verificar la seguridad del proyecto del reactor de investigación con arreglo a las normas de seguridad del OIEA.

La evaluación abarcó la organización operativa y la gestión del reactor, los comités de seguridad, la cultura de seguridad, la formación y cualificación del futuro personal operativo, el análisis de seguridad, la construcción, la puesta en servicio, la protección

radiológica, la gestión de residuos radiactivos, la planificación de emergencias y el plan de desmantelamiento.

En particular, debido al estado de construcción del reactor, se prestó especial atención a las áreas de construcción y puesta en servicio.

Como resultado de la misión, se confirmó la aplicación de las normas de seguridad del OIEA en el sistema de gestión desarrollado por ABEN. No obstante, el equipo de revisión identificó la necesidad de introducir mejoras adicionales, entre ellas el establecimiento de un comité de seguridad, mejoras en el programa de formación y cualificación del futuro personal operativo y una mayor participación del personal de ABEN en el programa de puesta en servicio.

Se destacaron las siguientes recomendaciones y sugerencias (*IAEA, 2024a*):

- Reforzar la formación en el puesto de trabajo del futuro personal operativo del reactor, entre otras cosas mediante la participación activa en las pruebas de puesta en servicio, a fin de garantizar la disponibilidad de personal cualificado para una explotación segura;
- Constituir oficialmente el comité de seguridad para que lleve a cabo una revisión y evaluación independientes de las actividades relevantes para la seguridad en los ámbitos de la puesta en servicio y la explotación;
- Reforzar la supervisión de la construcción y la puesta en servicio de la instalación por parte de ABEN, incluyendo la revisión y evaluación de los cambios de diseño importantes para la seguridad, las no conformidades y la verificación de los criterios de aceptación para las pruebas de puesta en servicio;
- Actualizar el programa de protección radiológica; y
- Establecer límites y condiciones de funcionamiento específicos para la puesta en servicio.

CONCLUSIÓN

El RR boliviano que se está construyendo en el CIDTN será la infraestructura nuclear situada a mayor altitud del mundo. La construcción y puesta en marcha de esta instalación está enfrentando desafíos que, gracias al eficaz esfuerzo conjunto y a la cooperación entre las compañías ABEN y GSPI-ROSATOM, se están superando con éxito, tal y como lo confirmó la misión del INSARR llevada a cabo. Sin embargo, es necesario prestar atención y realizar esfuerzos para abordar y aplicar las recomendaciones formuladas por la misión del OIEA, con el fin de llevar a cabo una fase de puesta en marcha exitosa y una transición segura a la operación.

Referencias bibliográficas

- Agencia Boliviana de Energía Nuclear. (2022). Complejo del Reactor Nuclear de Investigación. https://aben.gob.bo/index.php/informacion_institucional/-COMPLEJO-DEL-REACTOR-NUCLEAR-DE-INVESTIGACIN,1409.html
- Ahora el Pueblo. (2024). Llegan a Bolivia más de 43 toneladas de equipamiento tecnológico para el Reactor Nuclear de Investigación RB-01. https://ahoraelpueblo.bo/index.php/nacional/economia/llegan-a-bolivia-mas-de-43-toneladas-de-equipamiento-tecnologico-para-el-reactor-nuclear-de-investigacion-rb-01
- Asamblea Legislativa Plurinacional. (2019, 1 de agosto). Ley N° 1205. Ley para las Aplicaciones Pacíficas de la Tecnología Nuclear. Gaceta Oficial del Estado Plurinacional de Bolivia.
- International Atomic Energy Agency. (2024a). IAEA completes integrated safety assessment mission for Bolivia's first nuclear research reactor [Presse release]. https://www.iaea.org/newscenter/pressreleases/iaea-completes-integrated-safety-assessment-mission-for-bolivias-first-nuclear-research-reactor

- International Atomic Energy Agency. (2024b). Project management in construction of research reactors (Nuclear Energy Series No. NP-T-5.1). IAEA.
- Mercopress. (2024, 28 de octubre). Rosatom finaliza primer lote de combustible nuclear para Bolivia. https://es.mercopress.com/2024/10/28/rosatom-finaliza-primer-lote-de-combustible-nuclear-para-bolivia
- Osipovich, S. V., Kuatbekov, R. P., Lukichov, V. A., Sokolov, S. A., Tretiyakov, I. T. y Trushkin, V. I. (2012). A new generation of research reactors fuelled with LEU. En International Atomic Energy Agency, Proceedings of an International Conference on Research Reactors: Safe Management and Effective Utilization (p. 3). IAEA. https://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/P1575_CD_web/datasets/papers/F5%20Osipovich.pdf



I CONGRESO INTERNACIONAL

De Ciencias Puras y Naturales (CI-FCPN)