

LA VIDA, LA PROFESIÓN, Y SUS CAMINOS¹

Palabras clave: Materiales bajo condiciones extremas, Daño por radiación, Nanomecánica.
Key words: Materials under extreme conditions, Radiation damage. Nanomechanics.

De Bariloche a Suiza (dos veces), y de Bariloche a EE.UU. (tres destinos), el autor recorre los centros más importantes de la investigación nuclear y aún tiene tiempo para incursionar en la gestión de la investigación



Alfredo Caro

Research Professor – George Washington University

caroalfredo@yahoo.com - caro@gwu.edu

¹ Editor asignado: **Miguel A. Blesa**

Para quien está habituado a escribir publicaciones científicas, desprovistas de aspectos personales, es a la vez un desafío y una oportunidad reflejar aspectos íntimos de numerosos años de trabajo profesional. Ni bien recibí la invitación me pareció adecuado responder positivamente; la lectura de numerosas “Reseñas” ya publicadas me hicieron ver el valor que tal testimonio deja para las generaciones futuras: son fragmentos de historia, escritos por sus protagonistas. Agradezco a los promotores el llevar adelante esta iniciativa, y la distinción que me hacen al pedirme la mía.

Creo que la vida de muchas personas dedicadas a la ciencia se define en la infancia y, frecuentemente, por factores externos que influyen sobre una posible vocación latente. En mi caso, yo tuve una infancia y juventud fuertemente marcadas por mis padres. Luego de recibirse de técnico agrícola en la Escuela de Agricultura de Casilda, Provincia de Santa Fe, mi padre se mudó a Córdoba para estudiar en la universidad. Allí se recibió primero de Geólogo porque, según contaba, la carrera de Biología no se abría todos los

años sino cuando había suficientes alumnos, y luego de Biólogo y Dr. en Biología con orientación botánica, que era su verdadera vocación. Conservo una carta que le envió a su madre donde decía “... mañana rindiendo mineralogía; ¡habrá dos tigres en la mesa... y conmigo seremos tres tigres!...”; y al día siguiente un telegrama anunciaba “... saqué sobresaliente...” También conservo una foto recibiendo las felicitaciones de Bernardo Houssay alrededor de 1960, a poco de devenir uno de los primeros miembros de la recientemente creada Carrera del Investigador en el también reciente Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Los subsidios de dicha institución le permitieron viajar por todo el país recolectando plantas que cuidadosamente pasaban a integrar su herbario de la flora argentina, alojado hoy en el Museo de Botánica de la Facultad de Farmacia y Bioquímica de la Universidad de Buenos Aires, del que fue Director por 25 años. Muchos de esos viajes los hizo conmigo, dándome así la oportunidad de conocer todas las provincias argentinas. Mi madre fue maestra, una mujer inteligente con enorme vocación; así, en casa,

mientras ella preparaba sus clases y mi padre leía en su biblioteca, mi infancia transcurrió enmarcada en un fuerte ambiente de estudio.

En uno de esos viajes de recolección de plantas, mi padre me dejó frente al Centro Atómico Bariloche para que preguntara por el Instituto Balseiro. Allí me recibió un joven egresado, Norberto ‘Chiquito’ Baieretti; yo tenía 15 años y supe que esa visita marcaría mi destino.

En 1971 ingresé a la Universidad de La Plata para estudiar física, que entonces tenía un curso de ingreso de 3 meses en el verano, en vez del curso de 1 año que ensayaba la UBA, lo que me acercaba temporalmente a Bariloche. Tuve el privilegio de ser alumno de uno de los últimos cursos que dictó Carlos Bollini en esa Casa, uno de los físicos más relevantes del país, y el sino de vivir de cerca los conflictos que marcaron la terrible década del '70 en nuestro país. El tiempo me dio una perspectiva del significado de esos gases lacrimógenos o los avances de la policía montada en torno al comedor de la universidad, en su momento para mí era todo confusión.

El examen de ingreso al Instituto Balseiro, en el primer semestre de 1973, fue postergado un par de veces por los excepcionales momentos políticos que vivía el país, con la asunción de Cámpora en marzo y el retorno de Perón en junio. Fui seleccionado y en agosto viajé a Bariloche. Los años de estudiante en Bariloche representaron un período de crecimiento personal muy importante. El régimen de estudio, la vida en un campus, el grupo humano de profesores y estudiantes dejaron huellas indelebles y amistades de por vida. Adquirí allí no sólo los conocimientos para llevar adelante una profesión gratificante, sino también una membresía a un grupo humano extraordinario, cuyos beneficios me acompañaron toda mi vida.

Al mes de llegar se produjo el golpe de estado en Chile que derrocó a Allende; el nivel de debate político que se originó en esa pequeña comunidad era substancialmente más elevado que la violencia que caracterizaba La Plata. El año en que me gradué, 1976, no fue más fácil. Me quedó grabado, como síntesis de la violencia y prepotencia de ese período, el cartel que había en el kilómetro 8 de Bustillo, la ruta que une la ciudad con Llao-Llao, que decía: "No se detenga – El centinela hará fuego". En marzo de ese año, siendo delegado estudiantil en el Consejo Académico del Instituto, órgano colegiado de conducción, fui citado individualmente por el Director, como cada otro miembro del mismo, para comunicarme que de allí en más el Consejo sería sólo asesor.

Año y medio antes de la graduación, uno debía elegir el tema de la tesis de licenciatura, decisión que habría de influir sobre el futuro perfil de la carrera que uno seguiría. La característica de esos años es que no había becas de doctorado suficientes para los que queríamos

quedarnos en Bariloche, por lo que decidí optar por un tema que supuse sería de interés de la CNEA. Así conocí al Dr. Manuel Mondino en 1975 cuando, a poco de volver de una estadía en la Escuela Politécnica Federal de Lausanne en Suiza, y siendo jefe de la División Metales, inició en el CAB, un Programa de Materiales Irradiados, PMI, actividad ésta que resultaba de interés para CNEA, que ya contaba con recursos humanos en el tema en Buenos Aires y quería promoverlos en Bariloche. Destaco aquí que estudiar daño por radiación en una institución nuclear como CNEA es importante tanto por su efecto en materiales estructurales como en combustibles y dispositivos electrónicos.

Mondino ofreció becas de doctorado para formar estudiantes en el área y recibió una importante cantidad de equipamiento proveniente de Alemania como parte del acuerdo de transferencia de tecnología que vinculaba a CNEA con Siemens por la compra de Atucha-1, y de Francia, como parte de un amplio programa de cooperación vigente en esos tiempos. Esos equipos modernizaron significativamente la infraestructura de la División. También incorporó a un par de "cooperantes" franceses, jóvenes graduados universitarios que reemplazaban el servicio militar en Francia por 1 o 2 años de cooperación técnica en el extranjero.

Los miembros de ese incipiente Programa de Materiales Irradiados fuimos beneficiados por los 6 meses de sabático en Bariloche en 1976 del Prof. Alfred Seeger, director del Instituto Max Planck de metalurgia en Stuttgart, referencia obligada en el estudio de defectos en metales, con quien Mondino tenía estrecho contacto. El acelerador lineal de electrones del CAB sería la fuente de radiación gamma con la que se da-

ñarían los materiales que yo planeaba estudiar. También recibió de Suiza el equipo que yo habría de usar para mis experimentos: un dispositivo de medición de la disipación de energía de ondas elásticas en el rango de los kHz, con la precisión de la mecánica suiza, con criostato para nitrógeno líquido y calefactores para alta temperatura, todo instalado detrás de un blanco de plomo en el Linac de Bariloche. Invaluable para mi trabajo fue la colaboración del Ingeniero Ronald Roddick, quien diseñó la electrónica del equipo, y el personal del Linac, el Ing. Pedro Tadini y Max Schneebeli, con quienes entablé una estrecha amistad. Era la época en que se discutía la naturaleza de los defectos intersticiales en metales con estructura cúbica centrada en las caras (fcc); Seeger sostenía la hipótesis de dos tipos de intersticiales, *crowdions* y *dumbbells*, con una transición de unos a otros a cierta temperatura cercana a la del nitrógeno líquido. Aunque la idea de Seeger resultó incorrecta, la controversia de más de una década provocó un sinnúmero de publicaciones con experimentos y teoría en apoyo de ambas posturas, lo que me mantuvo ocupado por algunos años.

Así fue que mi trabajo de licenciatura consistió en montar esa facilidad de irradiación y realizar las primeras mediciones. Me presenté a becas de doctorado de CNEA y CONICET y las obtuve; acepté la segunda y en febrero de 1977 comencé entusiasmado mi trabajo de tesis. Sin embargo, los cambios ocurridos en Argentina como consecuencia del golpe de estado en 1976 indujeron a Mondino a modificar súbitamente sus planes y, a mediados de 1977, retornó con su familia a Lausanne, produciéndose una interrupción del PMI en Bariloche. Fue invitado como profesor visitante en la Escuela Politécnica, que contaba en ese entonces con un reactor de

investigación de 100 W, una poderosa fuente de cobalto de radiación gamma, y una fuente de deuterio-tritio para la producción de neutrones de 14 MeV. Así es que yo, a pocos meses de iniciar mi doctorado con una beca del CONICET, quedé sin director de tesis, en un tema que nadie más hacía en Bariloche. En Agosto de 1977 Magdalena, quien era alumna del último año del Instituto Balseiro, y yo nos casamos. En noviembre el ejército me llamó para el servicio militar obligatorio, que había prorrogado. Fue un año intenso.

■ PRIMERA PARTIDA

Días antes de la revisión médica del ejército, recibí una oferta de Mondino para continuar con el trabajo de doctorado en Lausanne, y otra oferta similar para Magdalena para trabajar en física de reactores híbridos fisión-fusión. El médico civil a cargo de la revisión comprendió la situación y, ante la sospecha de un ligero soplo al corazón, me declaró "inepto para todo servicio". Amigos que no tuvieron tanta suerte pasaron por experiencias duras en esos años terribles, que les quedaron marcadas de por vida. En febrero 1978 dejamos Argentina por primera vez, sin haberlo realmente planeado, y con la expectativa de volver a Bariloche tan pronto como fuera posible.

Los años vividos en Suiza fueron muy importantes tanto a nivel personal como profesional. País muy rico donde la ciencia se hace sin escaseces, y muy ordenado, donde todos los conflictos parecen haber sido resueltos centurias atrás, marcó nuestras vidas de manera indeleble. Recuerdo particularmente la celebración, en una estadía posterior que luego describo, de los 700 años de la creación de la Confederación Helvética, el 1 de agosto de 1991;

¡7 siglos de democracia sin conflictos internos! Con acceso a un acelerador Van de Graaf nuevo y todo el apoyo técnico para la construcción de un equipo que básicamente era un xilofón que oscilaba sometido al daño producido por el haz de electrones y cuya atenuación se medía digitalmente, rápidamente desarrollé mi trabajo de tesis que consistió en un estudio del dragado de defectos puntales por dislocaciones en movimiento. Publiqué mis primeros trabajos y visité un buen número de laboratorios europeos. La importancia del tema puede resumirse así: a diferencia de los defectos puntales en semiconductores, que pueden ser estudiados en detalle y dan lugar, entre otras cosas, a la existencia de los teléfonos celulares, los defectos puntales en metales permanecen ocultos a la mayoría de las técnicas experimentales de observación. Por ello, se los estudia indirectamente a través de los efectos que producen en otras cosas, por ejemplo, el comportamiento plástico, que está mediado por dislocaciones. Los defectos puntales afectan el movimiento de dislocaciones, en particular en lo que hace a las propiedades mecánicas como dureza, fragilidad, ductilidad, y elásticas, como la atenuación de ultrasonido.

A fines de 1980 me gradué y tuve el gusto de contar con Seeger en el jurado (¡como para mi tesis de licenciatura!) aunque mis resultados no apoyaban su hipótesis de dos tipos de defectos con "conversión". Una grave enfermedad de Úrsula, esposa de Mondino, oriunda de Bariloche y mujer extraordinariamente querida por todo el entorno de trabajo de Manolo, lo impulsó a retornar al país en esa misma época. Magdalena, que había iniciado un tema de tesis nuevo allí, en reactores híbridos de fisión - fusión, necesitaba un tiempo más para finalizarla, por lo que el director del Laboratorio de

Génie Atomique, Prof. Willy Benoit, me ofreció una posición postdoctoral. Más aun, me ofreció un viaje relativamente largo por Estados Unidos, mi primer viaje a este país donde ahora vivo, en el que visité una media docena de laboratorios y universidades donde había personas que me interesaba conocer.

Es en esta etapa que se produjo un cambio de dirección importante. Magdalena y yo queríamos volver a Bariloche tan pronto como fuera posible, pero yo pensé que, después de la experiencia de hacer física experimental en Suiza, iba a ser difícil adaptarme a hacer lo mismo en Bariloche, por lo que orienté mi postdoc hacia teoría, usando funciones de Green para dinámica de dislocaciones, tema que aprendí con un teórico norteamericano que había en el grupo y con quien publiqué un par de *papers* durante mi postdoctorado. Las razones para este cambio de tema son las mismas que me hacen tener admiración y respeto por todos los que desarrollan la infraestructura científica experimental en Argentina.

■ PRIMER REGRESO

Cuando en febrero de 1983 mi señora terminó su tesis volvimos a Bariloche, ambos con posiciones en CNEA y yo con el ingreso al CONICET algo retrasado por la guerra de Malvinas. Nuestra hija Florence tenía 2 años y medio y balbuceaba un tierno francés. El año 83 fue extraordinario en nuestro país. El regreso a la democracia, "con la que se come y se educa...", el programa de repatriación de científicos, en fin, una sensación de renacer.

En Bariloche no había estudios experimentales de daño por radiación; la iniciativa de Mondino había quedado trunca con su partida. Sí había teoría en metales, pero no

el tema que yo estaba aprendiendo, así que me incorporé a la División Teoría de Sólidos. Yo tenía mucho que aprender para estar a la par del grupo magnífico que allí había, y debo agradecer a un maestro de la talla de Blas Alascio (<https://aargentinapciencias.org/publicaciones/revista-resenas/resenas-tomo-2-no-2-2014/>), quien me impulsó a que tomara alumnos de maestría donde él actuaba de mentor... ¡de ambos! En ese período que duró 5 años, hasta 1987, trabajé en el tema de funciones de Green de defectos, ya mencionado, en transporte en sistemas desordenados, fractales, etc., temas que estaban de moda en esos años y con los que poco a poco iba adquiriendo las herramientas de la especialidad. Era la típica ‘*curiosity driven*’ manera de trabajar. Un par de viajes al ICTP de Trieste, con asistencia a conferencias en Europa, el nombramiento como profesor adjunto del IB, y de investigador adjunto del CONICET, iban cimentando mi carrera.

Construimos una casa con un crédito del Banco Hipotecario, nació nuestro segundo hijo, Alfredo, y así nos íbamos afincando en una época prometedora de Argentina: el inicio del gobierno de Raúl Alfonsín.

■ SEGUNDA PARTIDA

Lamentablemente la alegría duró poco. Hacia 1987 un brote de hiperinflación redujo nuestros salarios a niveles que introducían serias dudas acerca del futuro nuestro y de nuestros hijos. Cuando los ahorros llegaron a un nivel crítico, mi señora partió a Europa a buscar trabajo, y volvió con una oferta del *Paul Scherrer Institute*, PSI, en la Suiza alemana. A su vuelta, partí yo a hacer lo propio. En el PSI me entrevisté con Max Victoria, y su oferta laboral definió el rumbo del resto de mi carrera profesional.

Conocí a Max alrededor de 1980, cuando visitó la EPFL donde yo terminaba mi tesis. Intercambiamos sólo unas palabras. Él estaba de gira buscando su destino. Al tiempo que escribo esto, estoy en contacto con él para impulsarlo a que escriba su “Reseña”; es una historia digna de ser contada. Aquí solo diré que Max, físico del Balseiro de la cuarta promoción, y primera tesis experimental de Bariloche, debió exilarse en 1976 y después de algunos pasos intermedios, se instaló en el PSI a cargo de un programa europeo financiado por Euratom para estudiar daño por radiación en materiales para fusión, usando el acelerador de protones del PSI. Protones de 600 MeV no son lo mismo que los neutrones de 14 MeV de fusión, pero como estos últimos son muy difíciles de conseguir, Max propuso usar los primeros para irradiar potenciales candidatos a materiales estructurales y de primera pared en reactores de fusión. Con muy buena financiación, Max desarrolló allí un grupo experimental que tuvo gran impacto en el campo porque sus resultados eran únicos. Entender las diferencias del daño de ambos tipos de partículas llevó años de trabajo de toda la comunidad interesada en ello. Tal vez ayude a entender la importancia del tema el decir que no hay fuentes intensas de neutrones de 14 MeV, porque aún no hay fusión nuclear, de modo que la única manera de investigar el efecto que esos neutrones tendrán en materiales es a través de sustitutos. Existen muy pocos reactores “rápidos” para ensayo de materiales, con espectro neutrónico intenso en el rango del MeV; uno de ellos, en Rusia, tenía una lista de espera para aceptar muestras de varios años.

Al tiempo de mi visita, Max pensaba expandir su grupo al área de ciencias de materiales computacional. Vale mencionar que, en esos

años, Suiza tenía una significativa infraestructura en supercomputadoras, la época de las Cray’s, contaba con Michele Parrinello en IBM Zurich, Alfonso Baldereschi en la EPFL en Lausanne, y contactos con Roberto Car, que había sido postdoc en la EPFL, referentes del área; es decir que la ciencia de materiales computacional estaba en auge allí.

Esta ciencia de materiales computacional moderna tuvo una fecha de nacimiento con la publicación de *Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory* de R Car y M Parrinello en 1985 y de *Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals* de MS Daw, MI Baskes en 1984. Juntos, esos trabajos suman aproximadamente 25 mil citas, es decir, son seminales. El primero marcó el inicio de lo que es hoy una herramienta ineludible en ciencia de materiales, la dinámica molecular *ab-initio*, basada en estructura electrónica a nivel de la teoría de funcional densidad. El segundo trabajo venció la barrera que tenían los potenciales clásicos para dinámica molecular, que no podían capturar la esencia del enlace metálico.

Max vio la oportunidad que ofrecía Suiza en interés en el tema, infraestructura informática, y presencia de Parrinello como referente. Yo aportaba un cierto bagaje teórico y experiencia en daño por radiación. Para mí fue una oportunidad excelente, mi primera actividad allí fue ir a *Sandia National Laboratory* en Livermore California a tomar un curso sobre *Embeded-Atom Method* dictado por Daw y Baskes.

Los seis años que pasé en el PSI entre 1988 y 1993 fueron de los más prolíficos de mi carrera. Entre mis trabajos más citados, está *Ion-electron interaction in molecular-dy-*

namics cascades, con Max, de 1989 (Caro y Victoria 1989). La razón es que el estudio del daño por radiación, sinónimo de estudio de defectos, requiere el tratamiento de muchos grados de libertad en dinámica molecular. Eso excluye la opción *ab-initio* por el costo computacional, y deja a la aproximación clásica como única alternativa para la descripción de colisiones entre átomos y el poder de frenamiento electrónico. Indagar en esa frontera entre la descripción clásica y cuántica ha sido uno de mis temas de trabajo desde entonces.

En ese trabajo propusimos una manera empírica de incorporar los grados de libertad electrónicos en la descripción de la interacción de iones con sólidos, tema que hoy ha hecho un tremendo progreso con las computadoras y modelos actuales, tanto en el campo cuántico con la *time-dependent density functional theory*, como en el clásico, con versiones mucho más sofisticadas que la propuesta en aquel trabajo. Cuando un neutrón de MeVs de energía penetra un sólido y deposita sobre un núcleo, llamado ‘*primary knock-on-atom*’ o PKA, una cantidad de energía en el rango de los keV, se genera una cascada de colisiones cuya energía se disipa en algunos picosegundos. Una representación puramente clásica de la dinámica molecular capturaría el transporte de energía en términos sólo de fonones, mientras que, en un metal real, los electrones son más eficientes en esa tarea. De allí la necesidad de incorporar estos últimos de alguna manera, porque el tiempo que tarda esa energía en disiparse determina el tipo de daño que queda en el material. Una manera cualitativa de mostrar la complejidad se expone en la Figura 1.

La descripción cuantitativa del daño por radiación mediante técni-

cas computacionales es hoy rutinaria y precisa; como ejemplo, el final de vida del acero del recipiente de presión de Atucha 1, evaluada en el momento de su diseño y con un material de los años 60, se da cuando el daño llega a 0.01 dpa (dpa es una unidad de daño), mientras que hoy hay materiales que soportan 200 dpa. Esos cuatro órdenes de magnitud de diferencia son el resultado de la comprensión microscópica del daño adquirida en los últimos 50 años, en gran medida gracias a modelado computacional, y a un cúmulo enorme de resultados experimentales. Similarmente, la relevancia que

la comprensión de los mecanismos de daño tiene para la tecnología de fusión no puede ser ignorada. Aun cuando se pueda mantener estable por largo tiempo el plasma en tecnología de confinamiento magnético, o se logre el “encendido” del blanco de fusión en confinamiento inercial, cosas que todavía no se han logrado, quedará el problema de cómo extraer esa energía para darle un uso práctico. La “primera pared”, como se llama genéricamente al material que enfrenta al deuterio-tritio que se fusiona, deberá ser capaz de disipar una densidad de potencia de varios MW/ m² depositados en forma de

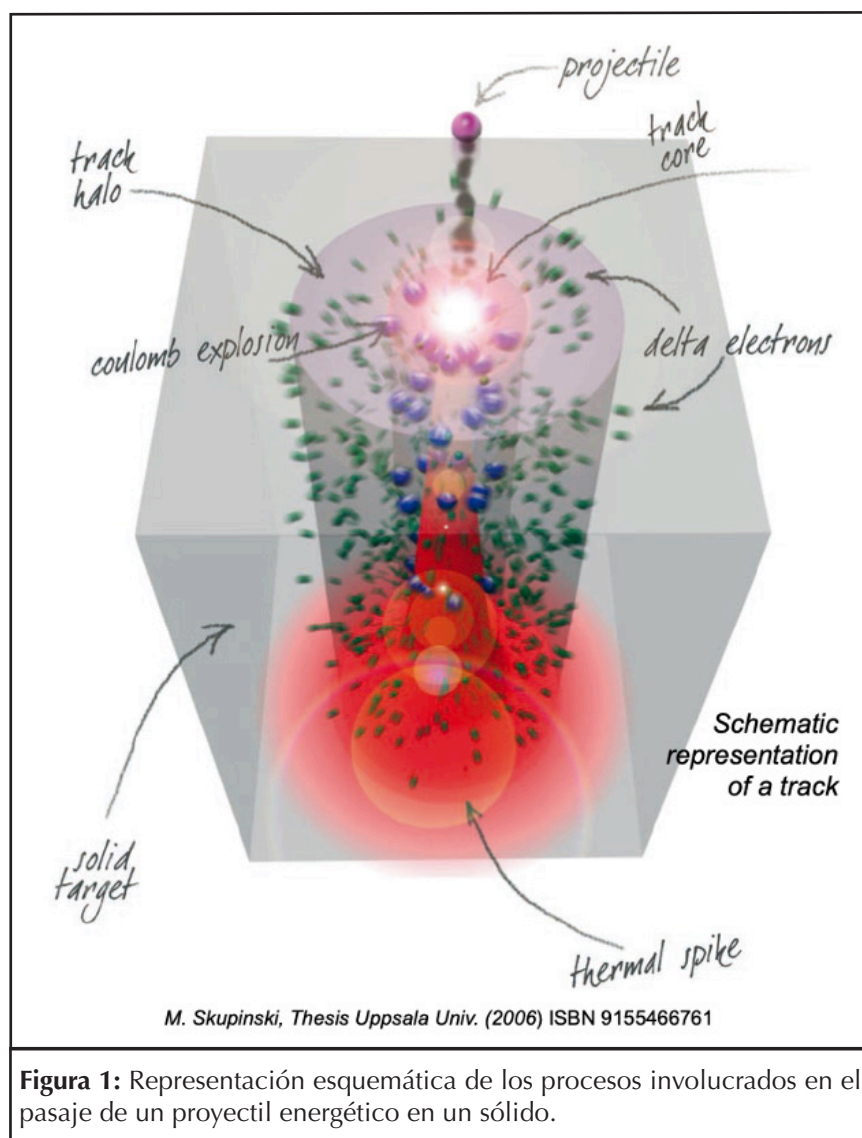


Figura 1: Representación esquemática de los procesos involucrados en el pasaje de un proyectil energético en un sólido.

rayos X, neutrones de 14 MeV, helio de 4 MeV, y átomos pesados del blanco en el caso de confinamiento inercial, tecnología esta última que, al ser pulsada, agrega además fatiga producto de los varios cientos de grados de amplitud térmica en la superficie. No hay material hoy que soporte esas exigencias por un tiempo tal que haga viable económicamente dicha tecnología, aunque el progreso es prometedor.

El plan de ir a Suiza por un año para recomponer la economía familiar y volver a Bariloche se vio perturbado no sólo por el entusiasmo con que trabajaba allí en estos temas, sino también porque Argentina entró en la hiperinflación del 89. Así fue que nos quedamos en Suiza por 6 años. Conferencias e intercambios me dieron la oportunidad de conocer numerosos colegas que fueron construyendo la red de relaciones en las que desarrollé esta profesión.

■ SEGUNDO REGRESO

El gobierno de Menem nombró como presidente de CNEA en 1989 a Manuel Mondino, mi director de tesis, con quien yo mantenía un contacto regular. Su gestión al frente de CNEA se inició en épocas de fuertes desafíos. Al inicio de la misma, la institución se abocaba a uno de los retos tecnológicos más importantes de su historia, como fue la reparación de Atucha I luego del incidente de 1988 en el que se rompió un canal refrigerante. La parada de la central en época de fuerte crisis energética en el país, con cortes y racionamientos, puso el tema en la primera plana de los diarios, alimentando la discusión a favor y en contra de la energía nuclear. La gestión de la anterior presidente de CNEA, Dra. Emma Pérez Ferreira, y su cercanía al presidente Raúl Alfonsín, fue determinante en la decisión de reparar la central aún con escaso

compromiso de su constructor, Siemens. Mondino continuó apoyando el proyecto y tuvo el placer de materializar la re-conexión de la CNA-I a la red en 1989.

También le cupo el rol de inaugurar en 1993, después de muchos años de construcción, la segunda planta industrial de agua pesada más grande del mundo, en Arroyito, Neuquén, destinada a proveer las necesidades de Atucha II y a la de las futuras centrales planeadas. Durante su gestión logró revertir la decisión del gobierno anterior de paralizar las obras de Atucha II, relanzando la construcción iniciada en 1981, con importante asignación de recursos humanos y materiales, situación que habría de cambiar drásticamente al año siguiente, provocando que finalmente la puesta en servicio se retrasara otros 20 años.

Es en ese período, en el que Mondino viajaba frecuentemente a Viena, que nos encontramos y surgió la posibilidad de volver a Argentina para ocupar la Dirección del Centro Atómico Bariloche y del Instituto Balseiro, cargos que desde su creación eran ejercidos por una misma persona y que lamentablemente fue cambiado poco después de mi gestión, dañando la unidad CAB-IB. Yo tenía 40 años y la cabeza llena de ideas sobre cómo modificar el funcionamiento del CAB en base a mi experiencia de once años en el exterior; era un desafío difícil de rechazar. La decisión familiar no fue fácil, mi señora y yo teníamos posiciones muy buenas en el PSI, mis hijos de 8 y 13 años estaban muy bien integrados en un sistema educativo excepcional. Prevaleció el desafío y en octubre de 1993 volvimos a Argentina por segunda vez; tomé el cargo de las manos de mi predecesor, Arturo López Dávalos ([https://aargentinapciencias.org/publicaciones/revista-resenas/resenas-tomo-](https://aargentinapciencias.org/publicaciones/revista-resenas/resenas-tomo-2-no-2-2014/)

[2-no-2-2014/](https://aargentinapciencias.org/publicaciones/revista-resenas/resenas-tomo-2-no-2-2014/)), a quien no sólo yo le tengo un gran respeto como persona y colega, sino toda la comunidad del CAB-IB, que lo despidió con ovaciones, redoblando el reto al que me enfrentaba.

Cuando miraba el funcionamiento de las instituciones de CyT en Argentina y las comparaba con el de instituciones similares que había conocido en otros países, me surgían ideas que pensaba se podrían implementar. Para mencionar sólo algunos de mis objetivos para aquella gestión nombraré la creación de la figura de postdoc para atraer talentos de afuera, por aquello de que la diversidad enriquece, figura que algunos años después creó el CONICET; la administración del presupuesto del CAB por proyectos, con evaluaciones *ex-ante* y *ex-post*, algo difícil dentro de la administración pública porque requiere presupuesto en el inciso "transferencias", modalidad que pocos años después estableció la ANPCyT; la realización de concursos internacionales para incorporar investigadores extranjeros formados, a un plantel que los supo tener en el pasado, pero que no tenía muchos en esa entonces, a fin de incorporar nuevas temáticas de investigación; y el inicio de contactos con el PNUD buscando apoyo para la creación de una carrera en tecnología de la información.

Nada de esto fue posible. Serías dificultades surgieron inmediatamente después de mi llegada al confrontar la conducción de CNEA la decisión del gobierno de privatizar las centrales nucleares y buscar financiación externa para la terminación de Atucha II. Una parte de quienes teníamos responsabilidades de conducción lo percibíamos como una amenaza a la continuidad de lo que habría de quedar de CNEA. Oponerse a esas modificaciones era mantener el rol rector de la CNEA

sobre las empresas, así como la interrelación de las mismas en torno al ciclo de combustible y las centrales nucleares. Parte de la conducción de CNEA veía que la desarticulación del sector implicaba el riesgo de dejar sin financiación las actividades de I&D de la "CNEA Residual", como se daba en llamar a lo que quedaba de los entes públicos privatizados, ya que, hasta entonces, la I&D en CNEA se financiaba en parte con la venta de la electricidad producida.

Los proyectos para el sector nuclear del ministro de economía Domingo Cavallo con su secretario de energía Carlos Bastos, y de Mondino eran contrapuestos, lo que dio lugar a una intensa discusión que tuvo amplia repercusión en la prensa y generó profundas divisiones en CNEA; Argentina tenía en esa época casi un 20% de electricidad de origen nuclear. El triunfo del primero dio lugar al Decreto 1540 de 1994 que condujo a la intervención del organismo, a la remoción del directorio, a la separación de las centrales nucleares en la empresa Nucleoeléctrica Argentina Sociedad Anónima, NA-SA, y a la creación de lo que es hoy la Autoridad Regulatoria Nuclear, ARN. El tiempo mostró que, como CNEA decía, las centrales nucleares no pudieron ser privatizadas, y la CNEA sufrió por más de una década su peor período de desfinanciamiento, hasta el relanzamiento del Plan Nuclear en 2006. El interventor Ing. Guillermo Padín estuvo en funciones 6 meses, en los cuales se implementó un duro programa de retiros voluntarios. Al normalizarse lo que quedaba de la institución con el nombramiento del Lic. Eduardo Santos en la presidencia a principios de 1995, concluyó abruptamente mi función en Bariloche, menos de dos años después de haber vuelto al país, dejándome en

una situación por demás incómoda dentro de CNEA.

La frustración, sumada al esfuerzo de desarraigo que había hecho la familia para dejar Suiza, invitaba a un momento de reflexión sobre el futuro. Con hijos de 10 y 15 años, decidimos quedarnos en Bariloche hasta que terminaran la escuela secundaria. Aproveché esos años en varias actividades que me dejaron muchas satisfacciones. La primera fue relanzar la colaboración con colegas en Suiza y Estados Unidos, con acceso a supercomputadoras, para investigar propiedades mecánicas de materiales nano-fásicos, tema que nacía en esos tiempos y es hoy ampliamente estudiado. Conocimientos milenarios de metalurgia indican que las propiedades mecánicas de los metales mejoran si son sometidos a deformación plástica y tratamientos térmicos en cuidadas secuencias. Imágenes de películas de herreros golpeando espadas calientes y luego sumergiéndolas en agua nos son familiares; las recetas intuitivas para las secuencias de calentar, golpear, enfriar... determinaban la dureza de las espadas y la suerte de los ejércitos. En los '50 se estableció la ley empírica de Hall-Petch que indica que la dureza de un metal es inversamente proporcional a la raíz cuadrada del tamaño de grano, válida para granos en el rango de 1 micrón a 1 milímetro (granos son los pequeños cristales que componen una pieza macroscópica de un metal policristalino). El interés por la escala nanométrica y la posibilidad de explorarla en el laboratorio dio origen a la pregunta de qué pasa si el tamaño de grano se vuelve nanométrico; ¿hay un límite superior a la dureza?

La capacidad de las supercomputadoras para ese entonces ya permitía simular con dinámica molecular clásica muestras de cientos

de millones de átomos, suficientes para describir un material nanofásico (material policristalino donde el tamaño de los granos está en la escala del nanómetro) representativo del comportamiento en volumen. Con colegas de Suiza y de Estados Unidos publicamos el primer trabajo que reportaba el límite de validez de la ley de Hall-Petch al entrar en el rango de nanoscala: descubrimos que el deslizamiento de bordes de grano venía en auxilio de la plasticidad cuando las dislocaciones no tenían ya espacio dentro de los granos, limitando de esa manera la dureza predicha por Hall-Petch; el paper *Competing plastic deformation mechanisms in nanophase metals* de 1999 (van Swygenhoven y col. 1999) recibe aún muchas citas. Remarco aquí que fue una predicción hecha con modelos computacionales, que posteriormente fue verificada experimentalmente. Destaco también a uno de los autores, Diana Farkas, egresada en 1975 del IB y profesora en Virginia Tech, donde se acababa de instalar una de las primeras CAVE, "virtual environment" creado por computadoras donde uno se sumergía en un espacio 3-D en el que las dislocaciones volaban a través de la habitación. Viajamos todos los autores a trabajar con ella y nos divertimos con una de las primeras manifestaciones de realidad virtual. Como suele suceder, nuestro paper tiene muchas citas, pero no es considerado el primero en reportar el "Inverse Hall-Petch behavior", privilegio concedido a otro grupo que poco después que nosotros publicó un paper más extenso y que bautizó el efecto con el nombre mencionado. Durante varios años publicamos un buen número de trabajos ahondando en estos temas que la supercomputación permitía abordar y que el desarrollo de las técnicas de *nanoindentación*, *nanopillar compression* y otras, permitían explorar experimentalmente. Hoy la

nanomecánica tiene un desarrollo extraordinario.

La segunda de las actividades que me brindó satisfacción en esa época fue responder a una invitación para colaborar con Juan Carlos Del Bello (<https://aargentinapciencias.org/wp-content/uploads/2021/03/02-RESENA-Del-Bello-CelResenasT9N1-2021.pdf>), Mario Mariscotti (<https://aargentinapciencias.org/publicaciones/revista-resenas/resenas-tomo-3-no-2-2015/>), y Francisco Paco de la Cruz (<https://aargentinapciencias.org/publicaciones/revista-resenas/resenas-tomo-1-no-1-2013/>), en la creación de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, ANPCyT, en 1997. Mi contribución fue en implementar el sistema de evaluación que De la Cruz proponía, basado en la consulta a pares en lugar de comisiones asesoras. Viajé a Washington por una semana para estudiar de cerca los procesos que utilizaba la *National Science Foundation*, la agencia más grande de EE.UU. para financiar las ciencias no-médicas. Relato esto por lo que va a suceder, 20 años después... Al volver, creo que fui yo, y espero que Mario o Paco no me desmientan, que propuse que todo sería *paperless* desde la primera convocatoria. NSF en ese entonces tenía una pequeña fracción de las propuestas tratada por medios electrónicos, el grueso era en papel. Desde Bariloche un grupo de ingenieros liderado por el Ing. Oscar Fernandez diseñó el *software* e instaló el *hardware* para tratar las aproximadamente 2500 presentaciones que se enviaron para la primera convocatoria. Elegimos los primeros coordinadores de las áreas temáticas, distribuidos por todo el país, y los guiamos hasta la realización de las reuniones de las comisiones con los pares evaluadores. Se seleccionaron los proyectos ganadores y por primera vez

en el sistema científico argentino, creo, se entregaron los fondos a los investigadores, a ser administrados por las Unidades de Vinculación que habían sido creadas poco antes en el marco de la Ley de Innovación Tecnológica. Creo que la Agencia marcó un antes y un después en la mecánica de la financiación de la investigación científica y tecnológica argentina.

La tercera actividad de relevancia para mi historia en ese período fue el trabajo de tesis del Ing. E. Lopasso. Con él desarrollamos métodos numéricos precisos para calcular energías libres a partir de potenciales clásicos del tipo de *Embedded Atom* que mencioné antes. Este trabajo se multiplicó en diversas aplicaciones en lo que sería mi próxima etapa. La relevancia del tema proviene del hecho que la dinámica molecular se utiliza para estudiar problemas de no-equilibrio; la evolución de un sistema en tales condiciones está determinada por los gradientes de un adecuado potencial químico, que son las fuerzas, y por las movilizaciones. Si los potenciales químicos no capturan la termodinámica del sistema con cierta precisión, el resultado es incierto. Calcular con precisión y rápidamente energías libres permite incorporarlas en el proceso de creación del potencial, junto con otra serie de propiedades, resultando así modelos mucho más robustos.

Gratificante también, claro está, fue mi experiencia como profesor del IB, tanto por la calidad e interés de los alumnos, como por la de los colegas profesores. Por último, menciono también otras experiencias interesantes. A través de contactos con Carlos Abeledo, realicé evaluaciones en Colombia y Venezuela de préstamos del BID, similares a los que tenía la ANPCyT para financiar parte de su actividad; y a través de Arturo López Dávalos, miembro de

la recientemente creada CONEAU, Comisión de evaluación y acreditación universitaria, participé de una de las primeras acreditaciones universitarias, en la Universidad Nacional de Salta. Realicé una consultoría para el ICTP sobre su compromiso con temas de tecnología nuclear y una para la UBA sobre su Secretaría de Ciencia y Técnica.

■ TERCERA PARTIDA

PRIMERA ETAPA

En 2001 Argentina tuvo una crisis que de nuevo echó por tierra las perspectivas individuales de estabilidad económica y progreso profesional, reafirmando nuestra decisión de partir. En diciembre de 2002, mi hijo terminó la secundaria y en febrero de 2003 emigramos a Estados Unidos. Esta vez, la tercera partida, sería la última; llevamos casi veinte años en este país y recientemente nos hemos jubilado. Pero estos últimos veinte años han sido fantásticos, plenos de experiencias nuevas y desafíos. Vamos por partes.

Buscar trabajo teniendo 50 años y en un país donde no tenía antecedentes laborales previos se presentaba como un desafío. Pero esta profesión funciona apoyada por la red de relaciones que uno forma durante su carrera. De hecho, durante mi segunda estadía en Suiza yo había tenido la oportunidad de invitar a pasar un mes a un joven postdoc de origen español, Tomás Díaz de la Rubia, con quien escribimos un par de trabajos sobre cómo describir con dinámica molecular colisiones atómicas en el rango de los keV que reprodujeran un *stopping power* nuclear compatible con el cúmulo de conocimiento que había en el tema. Tomás era un joven brillante que luego hizo una carrera estelar en *Lawrence Livermore National*

Laboratory, LLNL, en California. Lo contacté preguntándole si escribiría una carta de recomendación para mi búsqueda laboral en ese país. Me contestó que no era necesario, que me ofrecía un contrato por demás de generoso para ir a trabajar allí. También nos puso en contacto con el grupo que contrató a Magdalena. Fue la búsqueda laboral más corta de nuestras vidas.

Trabajar en un laboratorio nacional de Estados Unidos es una experiencia formidable. La “signature facility” de LLNL es NIF, la *National Ignition Facility*, el láser más grande del mundo para explorar fusión por confinamiento inercial. NIF estaba en construcción y tenía grupos de I&D en una amplia serie de temas. Yo tuve el gusto de trabajar en problemas de la primera pared del reactor, la que recibe radiación en diversas formas, y en el material del blanco que tiene por misión comprimir el combustible de fusión inercial hasta que se produzca el “encendido”. En el tema del blanco, tuve el placer de trabajar con un joven brillante egresado del IB en 1994, cuando yo era el director, quien estaba haciendo una carrera meteórica en LLNL y hoy es, desde Mendoza, un referente en ciencia de materiales computacional en Argentina, Eduardo Bringa. Él ya era un experto en la propagación de ondas de choque en materiales y entonces hicimos la simulación de dinámica molecular más grande de la que participé, con 100.000 procesadores y varias decenas de horas de cálculo. Era un “experimento” inaccesible para quienes no tuvieran tal potencia de cálculo. El resultado, que publicamos en una revista de alto impacto junto con experimentos realizados con un gas-gun, *Ultra-high strength in nanocrystalline materials under shock loading*, de 2005 (Bringa y col. 2005), tuvo y tiene muchas citas pues mostró que el deslizamiento de bordes de gra-

no que da lugar al ablandamiento descrito por la “*inverse Hall-Petch relation*”, que mencioné antes, era suprimido por la presión de la onda de choque, dando lugar así a un material de una extraordinaria e inesperada dureza. Esto es relevante pues influye en la manera en que la energía depositada por el láser es focalizada sobre el combustible de fusión, el centro del problema de “*ignition*” que mencioné antes.

La otra actividad en Livermore que fue muy satisfactoria fue la expansión de lo iniciado por Lopasso en Bariloche. Como ya mencioné, incorporar la termodinámica que predice un potencial clásico para dinámica molecular en el desarrollo del mismo, aumentaba significativamente la precisión de este tipo de aproximaciones. El material de interés eran las aleaciones de hierro-cromo, o acero inoxidable ferrítico, consideradas para aplicaciones estructurales tanto en fisión como en fusión nuclear. Yo tenía un subsidio de la *Office of Science, Fusion Energy Science* del Departamento de Energía, que financiaba este trabajo.

Cabe aquí una digresión: las explosiones en 2011 de tres de los edificios que albergaban los reactores de Fukushima fueron producidas por hidrógeno en contacto con el aire. El hidrógeno provino de la descomposición del vapor de agua que, en contacto con el circonio de las vainas combustibles, en un núcleo que se había fundido por falta de energía en las bombas de refrigeración, produce óxido de circonio más hidrógeno, en una reacción fuertemente exotérmica. El hidrógeno así liberado produce una reacción también fuertemente exotérmica con el oxígeno del aire, que se traduce en una explosión. Todos los metales se oxidan, pero el circonio lo hace con una avidez singular; en particular, la circonia, ZrO_2 , es tan estable que se

usa como símil del diamante en joyería. El circonio se usa en las vainas de los elementos combustibles de casi todos los reactores comerciales. La razón es una muy baja sección eficaz de captura neutrónica, lo que los hace perturbar poco el balance de neutrones del núcleo. Eso es importante en reactores de uranio enriquecido, pero más aún en los de uranio natural como los de Argentina. El accidente de Fukushima reavivó el interés por desarrollar “*accident tolerant fuels*” basados en otro metal para las vainas. Las aleaciones de FeCr son las candidatas y de ahí el interés en entender su comportamiento bajo irradiación. Vale mencionar aquí que hace pocos meses (en 2021) se introdujo por primera vez vainas de FeCr en un reactor comercial en EE.UU., y también que el acero austenítico (Fe-Ni) no es una opción porque el Ni produce helio bajo irradiación neutrónica.

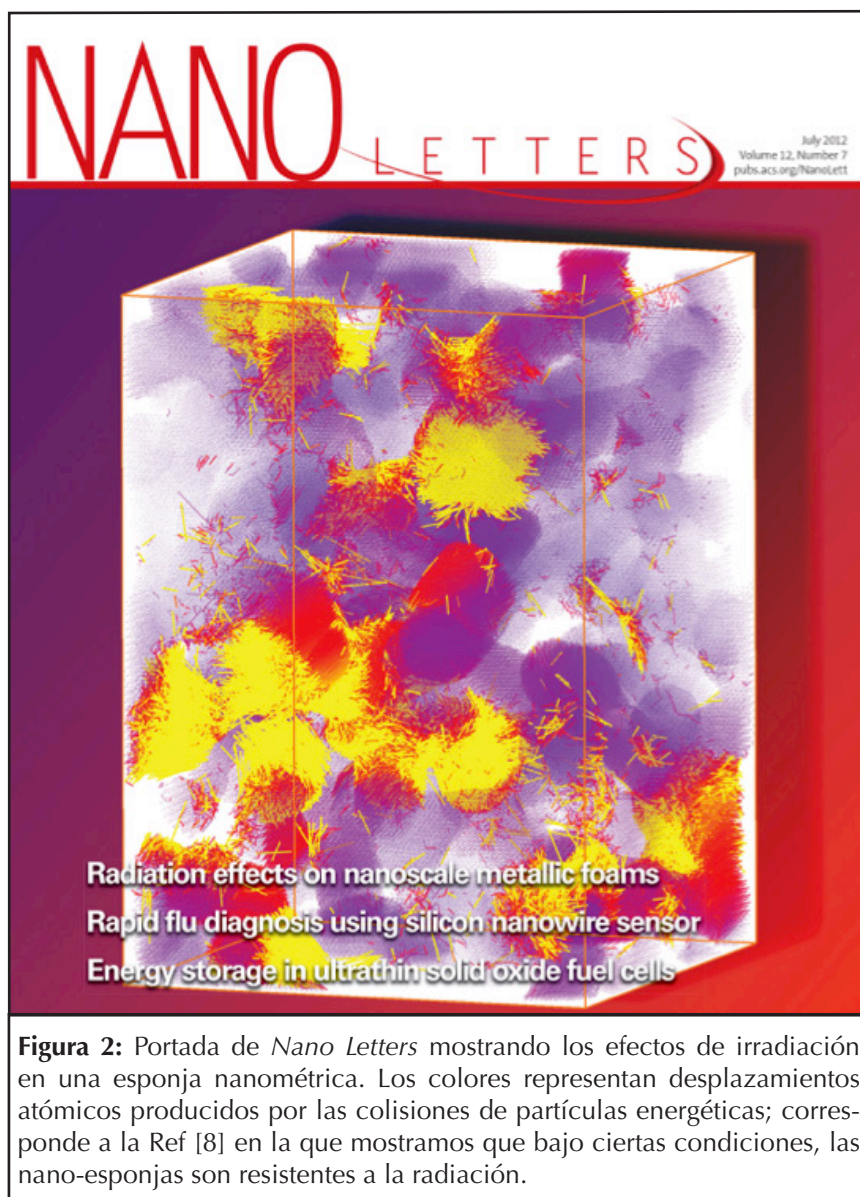
En FeCr se presentan sutilezas en la competencia del orden ferromagnético del Fe y el anti-ferromagnético del Cr, dando lugar a un cambio de signo en el calor de solución en función de la concentración de Cr, junto con un cambio en el orden de corto alcance, algo lejos de poder ser captado con las aproximaciones clásicas de entonces. Como hay una fase rica en Cr que precipita bajo irradiación, alterando las propiedades mecánicas, en particular, fragilizando el material, el tema era de importancia. La primera publicación, *Classical many-body potential for concentrated alloys and the inversion of order in iron-chromium alloys*, en 2005 (Caro y col. 2005), fue seguida por varias otras, expandiendo la idea de un “*Composition-Dependent Embedded Atom Method*”, CD-EAM, modelo similar al EAM, pero capaz de capturar esa sutileza. Este modelo fue bien recibido, y con sus predicciones propusimos un cambio en el diagrama

de fases del FeCr tal como aparece en el famoso libro de Massalski de diagramas de fases binarias: a bajas concentraciones de Cr, este sistema tiene fases ordenadas no descritas anteriormente. Esa publicación también marca un cambio de estrategia familiar, pues Magdalena y yo empezamos a trabajar juntos en más temas.

Siempre me impresionó la habilidad de los científicos en Estados Unidos para formar equipos destinados a abordar problemas de gran escala, sea para ir a la luna, con decenas de miles de colaboradores, o en menor escala para captar financiación de los programas de investigación del DOE, como el de *Energy Frontier Research Centers*, donde una importante suma de dinero, del orden de 20 MUSD por proyecto, se destina a grupos de 10-20 investigadores para tratar un tema complejo durante un período limitado de tiempo, usualmente 5 años. Me invitaron a participar de una propuesta para un *Center for Materials at Irradiation and Mechanical Extremes*, CMIME, cuya institución líder sería *Los Alamos National Laboratory*, y que involucraba otros laboratorios y varias universidades. Ganamos el subsidio y recibí un importante subcontrato en LLNL. Empecé a viajar regularmente a Los Alamos, en *New Mexico*. El tema era el estudio del rol de interfaces en el daño por radiación. De ese Centro salieron resultados muy interesantes, en particular el material nanoestructurado que resiste 200 dpa que mencioné más arriba. Hice varios trabajos relacionados a nano-burbujas de helio atrapadas en materiales de uso en fusión nuclear, siendo el de mayor impacto el *Radiation damage tolerant nanomaterials*, de 2013 (Beyerlein y col. 2013). El interés de este tema radica en que el He, subproducto de la fusión, es implantado en el material de la primera pared y allí precipita en

forma de burbujas, porque al ser químicamente inerte es insoluble. Para crear su espacio, las burbujas emiten lazos de dislocaciones hechos de intersticiales, que van a sumarse a la red de dislocaciones existente y contribuyen así a alterar las propiedades mecánicas del material original, en particular, lo fragilizan. Estas burbujas son nanoscópicas y no es fácil experimentalmente determinar cuánto He contienen. Nosotros desarrollamos una ecuación de estado válida a la escala nanoscópica, que tiene en cuenta el efecto de la inter-

face con el metal, que es dominante en esa escala, y así permite predecir la cantidad de helio que contiene. También, estudiamos el diseño cuidadoso de interfaces entre granos, como las llamadas “*twist boundaries*”, que permiten utilizar la red de dislocaciones que las caracterizan para brindar caminos por los cuales el He puede ser expulsado del material. Entre las publicaciones, destaco *The role of interface structure in controlling high helium concentrations* del 2012 (Demkowics y col 2012).



Por último, trabajé en el estudio de la respuesta de *nanofoams* a radiación. El punto de interés aquí es que al tener estas espumas en escala nanométrica una superficie por unidad de volumen extraordinaria, y al ser las superficies sumideros de defectos puntuales, postulamos la hipótesis de que el daño por radiación se recuperaría al recombinar intersticiales y vacancias en las superficies. Hicimos experimentos, simulaciones y modelos, y encontramos una región en el espacio de parámetros donde las espumas son notablemente tolerantes a la radiación. Publicaciones en este tema que recibieron buena acogida son: *Are nanoporous materials radiation resistant?* del 2012, que fue destacada en la tapa de la edición de *Nano Letters* de ese mes (Bringa y col. 2012), ver Figura 2, y *Mechanical response of nanoporous gold* del 2013 (Farkas y col. 2013), en el cual predijimos la existencia de una asimetría entre la respuesta a tracción y compresión de las nano-esponjas, observada luego experimentalmente.

SEGUNDA ETAPA

Lugar singular si los hay, Los Alamos es el laboratorio más grande del Departamento de Energía, con 4000 Ph Ds y 700 postdocs; tal concentración de conocimiento sobre un mismo techo constituye una formidable máquina de innovación científica y tecnológica. No tardé mucho en querer ir allí; me presenté a un concurso para una posición que representaba un avance respecto de la que tenía en LLNL y la obtuve. Lo propio hecho por Magdalena derivó en nuestra mudanza a las montañas de New Mexico en 2010, y por primera vez allí trabajamos en la misma División, con mayor superposición en los proyectos que emprendíamos.

Los Alamos es el mejor lugar donde he trabajado en mi vida. La

creación de Oppenheimer para el Proyecto Manhattan en 1942 sirvió de ejemplo no sólo para los otros 17 laboratorios del DOE en la actualidad, sino para muchos otros en el mundo. Se caracteriza por esa hábil combinación de investigación básica y aplicada, esa superposición de investigación “*curiosity driven*” y “*mission oriented*”, replicada en cierto modo por J. A. Balseiro en los orígenes del Centro Atómico Bariloche. Estimulantes discusiones, intensa –pero sana– competencia, significativa financiación, contacto con el mundo, son algunas de las características del lugar. Tal vez por eso, la comunidad de excelentes científicos argentinos que trabaja en el laboratorio es permanente y numerosa. La estructura más chica de la organización allí es el “*Team*”, y yo fui *Team Leader* del grupo “*Science of nuclear materials and fuels*”, un conjunto de una docena de colegas bien financiados, con numerosos postdocs.

Hacia el final de los 5 años del proyecto CMIME fui invitado a participar de otro EFRC, esta vez liderado por Oak Ridge National Laboratory en Tennessee, llamado *Energy Dissipation to Defect Evolution*, EDDE. Ganamos el subsidio, fui su *Deputy Director*, y recibí un significativo sub-contrato para LANL. La contribución de este Centro fue importante, porque marcó la mayor inversión del DOE en ese momento en el incipiente nuevo campo de *High Entropy Alloys*. La principal publicación que surgió de ese Centro recibe aun ahora un número importante de citas: *Influence of chemical disorder on energy dissipation and defect evolution in concentrated solid solution alloys*, de 2015 (Zhang y col. 2015).

La idea de ese EFRC puede resumirse así: la mayor parte de las aleaciones metálicas tienen muchas componentes, pero en general

un elemento es mayoritario; así, se habla de aleaciones de hierro, de níquel, de aluminio... En las HEA, la concentración es la misma para todos los elementos que la componen. En una solución sólida, la entropía configuracional S es máxima cuando las concentraciones de sus componentes son iguales y entonces, a temperatura T ambiente y superiores, el término de entropía en la energía libre $G = H - TS$ domina al término de entalpía de mezcla H si éste es pequeño, estabilizando así la fase desordenada frente a fases ordenadas o precipitación de segundas fases. Ahora bien, la radiación tiende a desordenar fases ordenadas, a precipitar nuevas fases o disolver precipitados en materiales con segundas fases, etc. Si la fase de equilibrio es ya una solución sólida desordenada, el desorden adicional introducido por la radiación no la afectará. Esta hipótesis tuvo un tremendo impacto en metalurgia moderna, de modo que el número de publicaciones en HEA en la actualidad es muy significativo y no deja de aumentar. Combinación de 5 o 6 metales de transición con bajas entalpías de mezcla en sus binarios, dan lugar a un enorme número de posibilidades, resultando fases bcc¹ (ej.: NbTaTiVW), fcc (ej.: CoCrCuFeNi), y hcp (ej.: CoFeReRu), con propiedades mecánica, de corrosión, de dureza, de radiación, etc., notables. La búsqueda experimental de nuevos materiales en un espacio de parámetros tan amplio es costosa y lenta, y es allí donde la ciencia de materiales computacional aporta su importante contribución.

Una de mis contribuciones en ese Centro fue en el área de la interacción de iones con los electrones de ese tipo de materiales, retomando el tema que había estudiado en Suiza más de veinte años atrás, pero con técnicas modernas y materiales nuevos. El desorden químico en una

red cristalina afecta el camino libre medio de los portadores de energía, los fonones y los electrones. Las HEA tienen el mayor grado de desorden posible preservando la estructura cristalina de equilibrio. Cómo afecta eso al transporte de energía en los procesos de colisiones inducidas por radiación era un tema de estudio en este Centro. Si el transporte se ve afectado significativamente, el tiempo de vida de la perturbación inducida por la radiación dura mucho, dando lugar así a un largo tiempo de recocido o “*annealing*”, que ayuda a que cada átomo desplazado encuentre su lugar en la red cristalina, haciendo al material resistente a la radiación.

Yo había sido educado en la técnica de *Time-Dependent Density-Functional Theory*, TD-DFT, por un experto colega argentino de la UBA radicado en Belfast, Jorge Kohanoff, a quien invité a pasar un verano cuando yo estaba todavía en Livermore. Con la incorporación de un joven talentoso que estaba haciendo una carrera brillante en LLNL, Alfredo Correa, egresado del IB en 2001, las supercomputadoras de Livermore, y la interacción con uno de los creadores de SIESTA (código de estructura electrónica basado en DFT y orbitales localizados), Emilio Artacho, de Cambridge, publicamos una serie de *papers* en un tema que progresó enormemente desde aquella época, en que SIESTA era el primer código en incorporar TD-DFT, hasta estar hoy disponible en muchos de los códigos de cálculo electrónico *ab initio*, uno de los cuales fue desarrollado por Correa. De nuevo, mi trabajo fue explorar la frontera entre la descripción cuántica y clásica de la interacción de proyectiles energéticos con blancos sólidos de estructura más compleja, llegando a modelos mucho más precisos que aquel de 1989 con Max Victoria, en particular, aquel modelo conside-

raba la interacción electrón-fonón como constante, sin ninguna dependencia ni del vector de onda del fonón, $\mathbf{q}$, ni de su polarización $\mathbf{s}$; el modelo actual, que desarrolló mayoritariamente Correa, contempla una dependencia en $\mathbf{q}$ y $\mathbf{s}$ que describe con gran exactitud el resultado del acoplamiento calculado usando mecánica cuántica, permitiendo así explorar modernos experimentos de interacción de pulsos de laser ultracortos con sólidos. Fue una época muy estimulante, colaborando con

colegas brillantes de quienes aprendí mucho. Un trabajo destacado de esa época es *Nonadiabatic forces in ion-solid interactions: the initial stages of radiation damage*, de 2012 cuya descripción gráfica obtuvo la portada de la edición de esa semana del Physical Review Letters (Correa y col. 2012); ver Figura 3.

Otro tema en el que trabajé en ese Centro EDDE fue el desarrollo de potenciales clásicos para esos materiales. Describir la termodinámica



Figura 3: Portada del *Physical Review Letters* mostrando una rendición artística de un proyectil y su nube electrónica viajando en el interior de un sólido; corresponde a la Ref [10] donde estudiamos el proceso de frenado, ionización y daño producido por una partícula energética penetrando un sólido.

de HEAs con cierto poder predictivo está en el límite de lo que se puede esperar de aproximaciones clásicas para las interacciones. Con Diana Farkas publicamos dos “toy models” que capturan algunas propiedades de aleaciones de 5 componentes, en particular para la aleación fcc de FeNiCrCoCu en ‘*Model interatomic potentials and lattice strain in a high-entropy alloy*’ en 2018 (Farkas y Caro 2018), y otro para (FeNiCrCo)_xAl_{1-x}, que al introducir Al agrega nuevas fases al sistema. Estas publicaciones están siendo bien acogidas por la comunidad de practicantes del modelado computacional.

TERCERA ETAPA

Pero como todo, llega una época en que uno busca nuevos horizontes y esta vez, pensando ya en un camino hacia la jubilación y en acercarnos geográficamente a nuestros dos hijos, ambos instalados en la costa este de Estados Unidos, con sendos doctorados en ciencias y familia, ahora con hijos, decidimos buscar una ocupación en la zona. La *National Science Foundation* tiene periódicamente concursos para *Program Directors*. Me presenté y lo obtuve. A fines de 2015 nos mudamos a Arlington, Virginia, en las afueras de Washington DC, donde NSF tenía sus oficinas centrales. Durante 40 años yo había estado del lado del que pide dinero a las agencias de financiación; ahora estaba del otro lado del mostrador, el que da el dinero. ¡Una experiencia interesantísima!

Hay mucho que aprender de la agencia de financiación más grande de Estados Unidos, y probablemente del mundo. Su sistema de evaluación, que yo había venido a estudiar veinte años atrás para la ANPCyT, me fue enseñado en numerosos cursos de “training”; el detalle con que son manejados los conflictos de in-

tereses, las reglas de ética, los procesos de evaluación, son notables. De hecho, al tomar el cargo uno jura que va a proteger la integridad de la institución, porque ella es “depositaria de la confianza pública”.

Una vez entrenado fui puesto a cargo, junto con un colega experimentado, del programa más grande de la *Division of Materials Research*, los *Materials Research Science and Engineering Centers*, MRSECs, programa de unos 60 millones de dólares al año. Similares a los EFRC del DOE ya descriptos, estos Centros son otorgados a las universidades más fuertes del país en materiales. Cada subsidio dura 6 años y hay unos 20 Centros en el país, que son evaluados cada dos años: al otorgar el subsidio, a los dos años con una visita al sitio del *Program Director* y un equipo de evaluadores, a los cuatro años con un “reverse site visit” en la sede de NSF, y otra vez al final. Así, dirigí las evaluaciones de los centros en Harvard, MIT, y otras universidades similares, visitando unas 15, distribuidas por todo el país, encabezando comisiones de evaluación de proyectos donde, en muchos casos, conocía a mis colegas evaluados; ¡toda una experiencia! También participé de la definición del llamado a concurso para un nuevo ciclo de Centros, que se realiza cada tres años. Simultáneamente estuve a cargo de un Programa más chico, llamado *Partnership for Research and Education in Materials*, PREM, que da subsidios a universidades de menor estatura en investigación, para que hagan una asociación con aquellas que son sedes de MRSECs, a fin de elevar el nivel de la investigación de las primeras. Así tuve la oportunidad de visitar y evaluar proyectos en universidades dedicadas a “Native Americans”, a las *Historic Black Colleges Universities*, HBCUs, creadas después de la guerra civil para brindar educación

superior a afroamericanos, hoy son racialmente mixtas, claro, y a aquellas dedicadas a brindar educación superior en comunidades hispánicas del sur del país y de Puerto Rico. En mi charla cuando dejé NSF dije que sentía que había hecho un “*Master en Minorities*”, tal fue el impacto que esa experiencia tuvo en mí.

En este país hay aún muchos problemas raciales, pero el esfuerzo que hacen las agencias gubernamentales para achicar la brecha despierta mi admiración. Finalmente participé de la preparación del llamado a las Academias de Ciencias para el trabajo llamado “*Frontiers of materials research: a decadal survey*”, en el que cada 10 años NSF pide asesoramiento a las Academias sobre cómo orientar la inversión en la próxima década. Formidable ejercicio de prospectiva del que se podría aprender tanto en Argentina. Considero que fue un privilegio cumplir el rol de *Program Director* que, dentro del mundo académico/científico en este país, es considerado un servicio a la comunidad y como tal, muy respetado.

■ EPÍLOGO

Llegando a los 65 años de edad, Magdalena y yo decidimos que era tiempo de retirarnos. Este es el país de las oportunidades y había sido generoso con nosotros, pero a un precio. Aquí el ritmo de trabajo es muy intenso, la dedicación es total, la competencia es permanente. Es difícil explorar otros intereses de la vida bajo ese régimen. Es común aquí cuando un investigador deja un empleo de tiempo completo, asociarse a una universidad en calidad de *Research o Adjunct Professor*. Estos cargos no tienen remuneración, pero permiten invocar la afiliación para participar de subsidios que, llegado el caso, administra la universidad con un *overhead*. Así es que

desde hace unos años soy *Research Professor* en *George Washington University*, e invoco esta afiliación en seminarios y conferencias, y en proyectos y publicaciones que aún hago con antiguos colaboradores. Completan mis ocupaciones tareas de consultoría en el área de evaluación de proyectos donde doy opinión en base a mi experiencia en NSF. Últimamente colaboro con una "start-up" que se interesa en desarrollar la propulsión nuclear para ir a Marte y, como no podía dejar el tema, ¡en dispositivos para blindar

de la radiación solar y cósmica a la tripulación en el viaje hasta allá!

El proceso de innovación tecnológica funciona a un ritmo vertiginoso nunca visto antes; el mundo es en un hervidero de ideas. En el ámbito privado, no es más la época de las grandes corporaciones como Lucent o IBM con sus centros de I&D, ahora son las formidables riquezas generadas por las empresas que se vuelcan como fondos de inversión para apoyar un sinnúmero de pequeñas compañías que exploran ideas arriesga-

das que, si resultan exitosas, suelen luego vendidas a las grandes. En el ámbito público, los organismos de financiación desarrollan métodos de gestión cada vez más competitivos para fomentar la capacidad creadora del recurso humano con el que trabajan y mejorar así la eficiencia de la inversión. Los campos que revolucionan la vida en la actualidad pertenecen a la bio- y nano-tecnologías, las ciencias de la información y la cognitiva; junto con las exigencias de la preservación del medio ambiente y la transición ener-

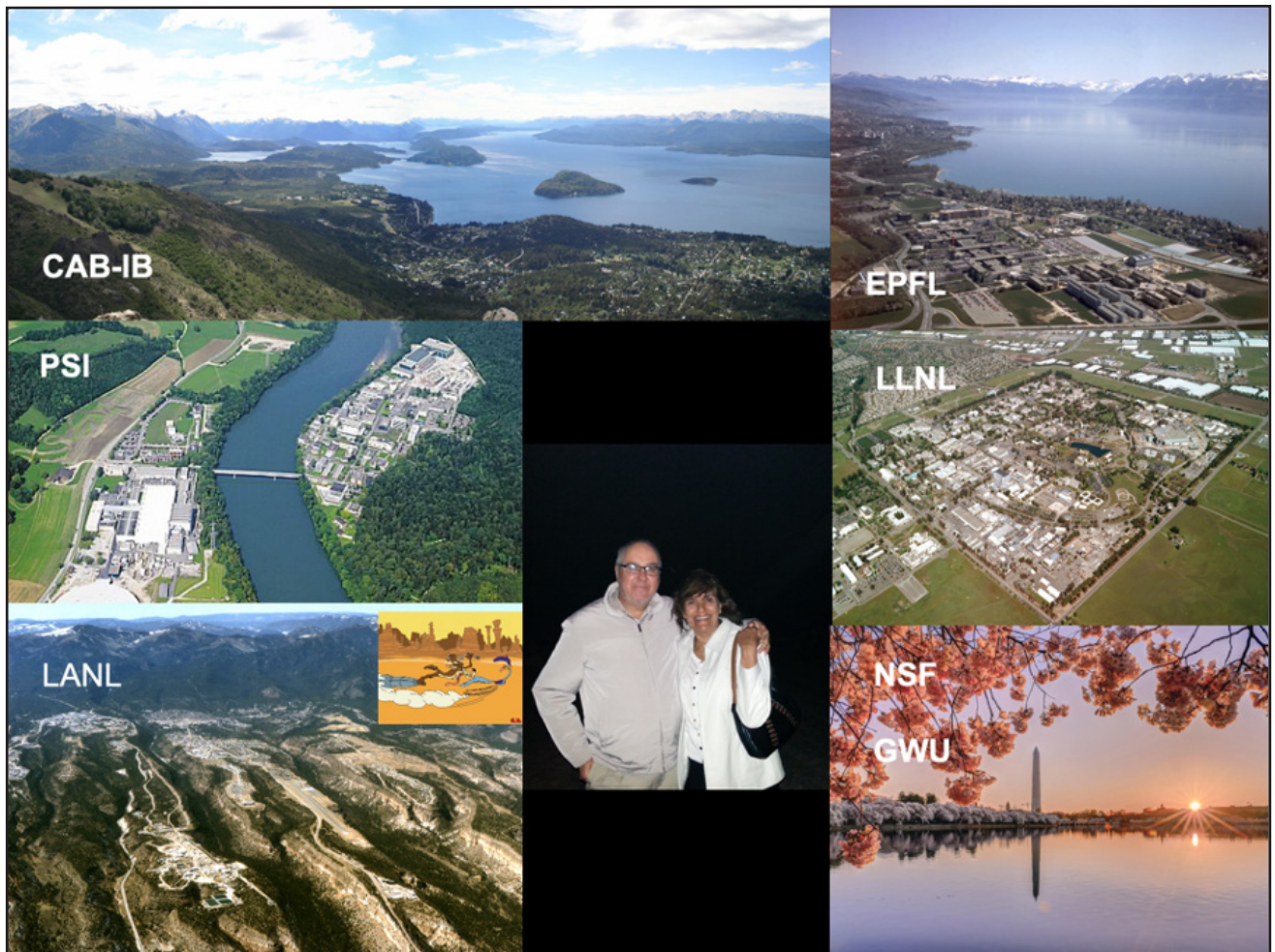


Figura 4: Vistas de los lugares donde hemos trabajado. Comenzando por el ángulo superior izquierdo: El Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro; la *École Polytechnique Federale* de Lausanne, en Suiza; el *Paul Scherrer Institute* en Villigen, Suiza; el *Lawrence Livermore National Laboratory*, en Livermore California, EE.UU.; Los Alamos *National Laboratory*, en Los Alamos, New Mexico, EE.UU.; la *National Science foundation* y la *George Washington University* en Washington, DC, EE.UU.

gética definen hoy el futuro. Esos temas atraen a la juventud capturando su imaginación. ¡Quién tuviera 50 años menos para empezar de nuevo!

Y así llego al final de este relato. Elegí mezclar los viajes, sus razones, y el trabajo hecho en cada destino, para dar una descripción viva de 45 años de vida profesional en el campo de materiales en condiciones extremas, como se lo llama hoy. Viví el auge de la fisión nuclear de los 70, el freno de los 80 y 90, el renacer de los 2000, y el nuevo freno de los 2010s. Me queda la impresión que la tecnología nuclear de fisión está madura, pero que por segura se hizo cara, que puede tener otra oportunidad en la transición energética, principalmente con los reactores pequeños o SMR, y que Argentina podría jugar un rol en ello, si se lo propusiera como meta. En cuanto a la fusión, creo que aún le falta tiempo, y que corre el riesgo de llegar tarde frente a otras tecnologías energéticas.

Elegí mencionar mis colaboradores argentinos entre los muchos con quienes tuve el gusto de trabajar, para resaltar esa formidable red de talentos desparramados por el mundo. Me considero un hombre de suerte; me eduqué en ciencias en Bariloche con un grupo de gente que aprendí a admirar y respetar. Con esas herramientas viví y trabajé en tres continentes, aprendí tres idiomas, me fui tres veces de mi país, y volví en dos oportunidades, todo ello acompañado de una mujer extraordinaria con quien he compartido la vida e intereses similares. Nuestras partidas de Argentina no estuvieron vinculadas a la violencia política que sacudió a mi generación y afectó a tantos compatriotas, sino más bien al deseo de explorar nuevas oportunidades, y a otros factores que ya describí. En los puntos críticos de mi trayectoria tuve la

suerte de contar con la confianza de personas que me brindaron oportunidades, como Willy Benoit, Manuel Mondino, Máximo Victoria y Tomás Díaz de la Rubia; este relato es mi manera de dejarles testimonio de mi agradecimiento.

Es común hacer mención a la educación pública, un valor fundamental de la organización social argentina. Mi educación secundaria fue en la Escuela Normal Antonio Mentrut de Lomas de Zamora; guardo un recuerdo agradecido a sus profesores y mantengo amistades de por vida. Más tarde, tuve el privilegio de estudiar en el Instituto Balseiro, como estudiante becado, luego tuve el placer de ser profesor allí, y por último tuve el honor de dirigir el Centro Atómico Bariloche y el propio Instituto Balseiro; en Argentina completé un ciclo. En los últimos 20 años, aunque lejos, no dejé de interesarme por el destino de esa institución y el de la actividad nuclear del país, buscando interactuar con quienes quisieron escuchar las reflexiones que son fruto de las experiencias profesionales que he vivido.

A veces mis hijos me preguntan si valió la pena tanto movimiento; no lo sé, sólo puedo contarles mi experiencia; la vida se vive una sola vez.

■ REFERENCIAS

Para un listado completo ver Google Scholar aquí <https://scholar.google.com/citations?user=qDYJB-YAAAAJ&hl=en&oi=ao>.

Beyerlein I. J., Caro A., Demkowicz M. J., Mara N. M., Misra A., Uberuaga B. P. (2013) [Radiation damage tolerant nanomaterials](#) Materials today 16 (11), 443-449

Bringa E. M., Caro A., Wang Y., Victoria M., McNaney J. M., Remington B. A. (2005) [Ultrahigh strength in nanocrystalline materials under shock loading](#) Science 309 (5742), 1838-1841

Bringa E. M., Monk J. D., Caro A., Misra A., Zepeda-Ruiz Z., Duchaineau M. (2012) [Are nanoporous materials radiation resistant?](#) Nano letters 12 (7), 3351-3355

A Caro A., M Victoria M. (1989) [Ion-electron interaction in molecular-dynamics cascades](#). Physical Review A 40 (5), 2287

Zhang Y., Stocks G. M., Jin K., Lu C., Bei H., Sales B. C., Wang L., Béland L. K., Stoller R. E., Samolyuk G. D., Caro M., Caro A., Weber W. J. (2015) [Influence of chemical disorder on energy dissipation and defect evolution in concentrated solid solution alloys](#) Nature communications 6 (1), 1-9

van Swygenhoven H., Spaczer M., Caro A., Farkas D. (1999) [Competing plastic deformation mechanisms in nanophase metals](#) Phys Rev. Lett. 60, 22

Caro A., Crowson D. A., Caro M. (2005) [Classical many-body potential for concentrated alloys and the inversion of order in iron-chromium alloys](#) Physical review letters 95 (7), 075702

Correa A. A., Kohanoff J., Artacho E., Sánchez-Portal D., Caro A. (2012) [Nonadiabatic forces in ion-solid interactions: the initial stages of radiation damage](#) Physical Review Letters 108 (21), 213201

Farkas D., Caro A. (2018) [Model interatomic potentials and lattice strain in a high-entropy alloy](#)

- Journal of Materials Research 33 (19), 3218-3225
- Demkowicz M. J., Misra A., Caro A. (2012) [The role of interface structure in controlling high helium concentrations](#) Current opinion in solid state and materials science 16 (3), 101-108
- Farkas D., Caro A., Bringa E., Crowson D. (2013) [Mechanical response of nanoporous gold..](#) Acta Materialia 61 (9), 3249-3256

■ NOTAS

1 Bcc: *body centered cubic*; fcc: *face centered cubic*; hcp: *hexagonal close packing*