



REPORTES CIENTÍFICOS

DE LA FACEN

ISSN 2078-399X
Volumen 2
Número 1
2011

Observación de la
circunferencia de la Tierra
en Paraguay.

Procesos de ramificación:
una aplicación en la
población americana.

Estudio teórico de las
propiedades moleculares
del antibiótico cinoxacina
al nivel de teoría B3LYP/6-
311++G(d,p).

Estudio computacional del
radical CISO₂ al nivel de
teoría B3LYP/6-311+G(d).

Anfibios de la Bahía de
Asunción (Distrito de la
Capital, Paraguay).

PUBLICACIÓN CIENTÍFICA
DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN-PARAGUAY



REPORTES CIENTÍFICO DE LA FACEN



Reportes Científicos de la FACEN, publicación Oficial de Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de Universidad Nacional de Asunción, emitida semestralmente. Publica artículos originales, artículos de revisión, temas de actualidad reportes de casos, comunicaciones cortas y cartas al editor en las áreas de Biología, Química, Física, Matemáticas Pura, Matemática Estadística, Geología y Tecnología de Producción. Los trabajos y opiniones que se publican en la revista son de exclusiva responsabilidad de los autores. La revista se reserva todos los derechos.

REPORTES CIENTÍFICOS DE LA FACEN

Dirección postal

Reportes Científicos de la FACEN, Coordinación de Investigación de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Campus Universitario, Casilla de Correo 1039, San Lorenzo, Paraguay.

Teléfono/Fax

595 21 585600

E-mail

facen@facen.una.py

Dirección web

<http://www.facen.una.py/es/news/revistacientifica>

Revista indexada a:

Latindex

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN

Ing. Pedro González

Rector

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Prof. Constantino Nicolás Guefos Kapsalis, MAE
Decano

Dirección Web

www.facen.una.py

CUERPO EDITORIAL

Editor en Jefe:

Deidamia Franco

Comité Editorial:

Dra. Celeste Vega – Centro de desarrollo de la investigación científica (CEDIC)

Dra. Miriam Rolon Centro de desarrollo de la investigación científica (CEDIC)

Dra. Norma Caballero FACEN – UNA

M. Sc. Andrea Weiler FACEN – UNA

Dr. Miguel Vázquez – FACEN – UNA

M. Sc. Gladys Ortiz – FACEN – UNA

M. Sc. Cristina Morales – Guyrá Paraguay

Dr. Alberto Yanosky - Guyrá Paraguay

Dra. Antonieta Rojas de Arias – OPS- PY

Dr. Gilberto Paez – CATIE

Dr. Robert Owen – Texas Tech University

Asesor estadístico

M. Sc. Ricardo Olmedo

Secretario

Lic. César Benítez Torres – FACEN – UNA

Diagramación

Msc. Bolivar Garcete

Revisión y corrección del inglés

M. Sc. Juan Carlos Velázquez

Diseño de tapa:

César Arce

Impresión

Grafica SALPA S.R.L.

Fotografía de Tapa: “Burbujas de figuras geométricas” Nadia Villalba Villalba. 4to. Puesto Premio Nacional de periodismo científico escrito y fotografía CONACYT – convocatoria 2011, 2da. Edición.

Rep. cient. FACEN	San Lorenzo (Paraguay)	Vol. 2, N° 1	enero-junio de 2011	ISSN 2078-399X (versión impresa) ISSN 2222-145X (versión online)
-------------------	------------------------	--------------	---------------------	---

REPORTES CIENTÍFICOS

DE LA FACEN

ÍNDICE DE CONTENIDOS

Rep. cient. FACEN	San Lorenzo (Paraguay)	Vol. 2, Nº 1	enero-junio de 2011	ISSN 2078-399X (versión impresa) ISSN 2222-145X (versión online)
-------------------	------------------------	--------------	---------------------	---

EDITORIAL

- 3 **Franco de Diana, D.** Año Internacional de la Química.

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 5-11 **Doncel, F.; Takashi Momiyama, T. & C. González.** Observación de la circunferencia de la Tierra en Paraguay.
- 12-23 **Giménez Sena, F. & X. Bordina i Simorra.** Procesos de ramificación: una aplicación en la población americana.
- 24-31 **Bernis Urbieta, D. A.; Caballero, N. B.; Badenes, M. P. & C. J. Cobos.** Estudio teórico de las propiedades moleculares del antibiótico cinoxacina al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p).
- 32-37 **Benítez, R.; Caballero, N. B.; Badenes, M. P. & C. J. Cobos.** Estudio computacional del radical ClSO₂ al nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d).
- 38-44 **Caballero Gini, A.; Airaldi Wood, K.; Ferreira Riveros, M. & L. Romero Nardelli.** Anfibios de la Bahía de Asunción (Distrito de la Capital, Paraguay).

ARTÍCULOS DE REVISIÓN

- 45-72 **Baéz Presser, J. L.** Distinción Sismológica entre el manto Arqueozoico y el Proterozoico: la raíz de la litosfera bajo la Cuenca del Paraná, América del Sur.

COMUNICACIONES CORTAS

- 73-76 **Cacciali, P.** Nueva localidad para *Leptodeira annulata* (Serpentes: Dipsadidae) en la Región Oriental de Paraguay, y datos sobre su distribución.

COMUNICADOS DEL CUERPO EDITORIAL

- 77-84 Guía para la presentación de artículos científicos en la revista "Reportes Científicos de la FaCEN".



EDITORIAL

Año Internacional de la Química

El año 2011, coincidente con el centenario del Premio Nobel otorgado a Marie Curie por sus aportes a la Química, fue proclamado por la Naciones Unidas como el AÑO INTERNACIONAL DE LA QUÍMICA”, bajo el lema: “Química, nuestra vida y nuestro futuro”. A través de este lema se pretende que el público en general valore el papel que tuvo, tiene y tendrá en el futuro esta Ciencia en la resolución de problemas asociados al mejoramiento de la calidad de vida de la población, a fomentar el interés de los jóvenes por la Química y a reconocer la contribución de las mujeres a esta disciplina.

En Paraguay, la investigación científica en esta Ciencia va en aumento, generando conocimientos en diferentes ámbitos, por lo que se hace prioritario e imprescindible estimular desde nuestras Instituciones a los grupos multidisciplinarios de investigación en las Ciencias Básicas, que involucren a la Química, ya que asociada a otras disciplinas se ha logrado un desarrollo científico tecnológico muy importante para el ser humano, como fuentes alternativas de energía, nuevas drogas para el tratamiento de enfermedades, fuentes alternativas de alimentación y avances propiciados en la Biología y en los materiales.

La Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Asunción, no ha estado ajena a esta conmemoración, por lo que REPORTE CIENTÍFICOS de la FACEN, adhiriéndose a todas las actividades realizadas dentro del marco de celebración, dedica este número al Año Internacional de la Química, como un reconocimiento a los aportes al conocimiento que han dejado especialmente las mujeres docentes y estudiantes, a través de los diferentes grupos de investigación a lo largo de nuestra Historia.

Deidamia Franco de Diana

Editora

OBSERVACIÓN DE LA CIRCUNFERENCIA DE LA TIERRA EN PARAGUAY**OBSERVATION OF THE CIRCUMFERENCE OF THE EARTH IN PARAGUAY**FREDY DONCEL^{1,2}, TAKASHI MOMIYAMA³, CARLOS GONZÁLEZ²¹Facultad Politécnica, Universidad Nacional de Asunción²Departamento de Física, FaCEN³Voluntario Senior de la JICA

Resumen: En el solsticio de verano del 22 de diciembre de 2005, la sombra del Sol fue observado desde diferentes lugares en Paraguay. La circunferencia del meridiano terrestre fue calculada por el método de Eratóstenes y que derivaron errores menores al 1,57%. También la circunferencia ecuatorial de la Tierra fue calculada a partir de la diferencia angular de la sombra entre dos lugares sobre el trópico de Capricornio obteniéndose valores con errores de 0,74%. Esta observación fue la primera experiencia en Paraguay

Palabras clave: *Circunferencia terrestre, Trópico de Capricornio, Paraguay*

Abstract: In the summer solstice of December 22, 2005, the shadow of the sun was observed from different locations in Paraguay. The circumference of the Earth's meridian was calculated by the method of Eratosthenes and derived errors less than 1.57%. Also the Earth's equatorial circumference was calculated from the angular difference of shade between two places on the Tropic of Capricorn obtaining values with errors of 0.74%. This observation was the first experience in Paraguay.

Key words: *Terrestrial circumference, Tropic of Capricorn, Paraguay*

INTRODUCCIÓN

Sobre el trópico de Capricornio, durante el solsticio de verano del 22 de diciembre de 2005, los objetos verticales no proyectan sombras. Es bien conocido que Eratóstenes quien vivió en Alejandría, Egipto tres siglos antes de Cristo había estimado la circunferencia de la Tierra usando este fenómeno natural. El escuchó de los habitantes de Syene, que está situada a 800km de Alejandría que durante el solsticio de verano el Sol al mediodía en la ciudad estaba directamente por encima de la cabeza de uno, de manera tal que los objetos en forma vertical no proyectaban sombra alguna. Por otra parte Eratóstenes sabía que tal cosa no ocurría en Alejandría, y que en el mismo día el Sol estaba a 7 grados o un quinto del ciclo completo, fuera del Cenit. El asumió entonces que la tierra era redonda, así que la circunferencia total de la Tierra debería ser de cincuenta veces la distancia entre las dos ciudades. Su resultado es equivalente

a 40.000km; bastante cerca al mejor valor estimado modernamente

El propósito de esta observación utilizada es por el hecho de que el Trópico de Capricornio pasa por Paraguay y calcular la circunferencia del meridiano terrestre usando el método de Eratóstenes y también calcular la circunferencia ecuatorial observando la sombra del Sol desde dos lugares distintos sobre el trópico de Capricornio al mismo tiempo.

ECUACIONES**1. La circunferencia del meridiano terrestre**

En la Figura 1, cuando el punto de observación A tiene una distancia de L del trópico de Capricornio, y el mínimo ángulo de la sombra en el solsticio de verano es θ (grados), la circunferencia del meridiano L_m es

$$L_m = \frac{L \cdot 360}{\theta}$$

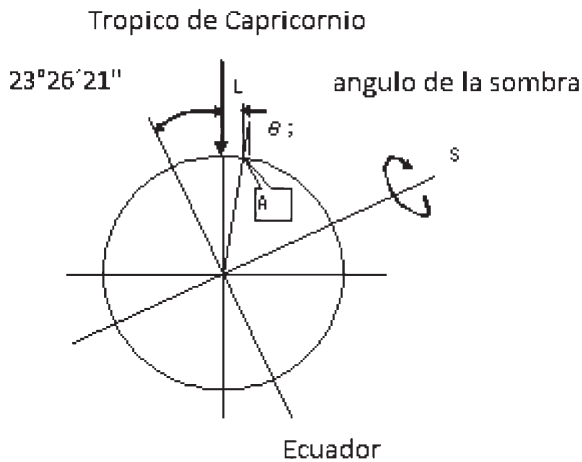


Fig. 1. Cálculo de la circunferencia del meridiano terrestre.

2. La circunferencia ecuatorial

Vista de V de la figura 2, la diferencia angular de la sombra entre el punto A y el punto B, $\Delta\theta$ (grados), es

$$\Delta\theta = \theta_B - \theta_A$$

Donde θ_A y θ_B son los ángulos de la sombra del punto A y el punto B observados al mismo tiempo. Y el punto B está más al Este que el punto A. Cuando la distancia entre el punto A y el punto B es L la circunferencia del trópico de Capricornio L_c es

$$L_c = \frac{L \cdot 360}{\Delta\theta}$$

El radio del Trópico de Capricornio r_1 es

$$r_1 = \frac{L_c}{2 \cdot \pi}$$

El radio del ecuador r_0 es

$$r_0 = \frac{r_1}{\cos(23^\circ 26' 21'')}$$

Entonces, la circunferencia del ecuador L_e es

$$L_e = 2 \cdot \pi \cdot r_0$$

OBSERVACIÓN

La observación consistió en medir el ángulo de la sombra del Sol alrededor del mediodía del solsticio de verano (22 de diciembre de 2005). Para calcular la circunferencia del meridiano, cualquier lugar en Paraguay sin proximidad al trópico de Capricornio puede ser adecuado para la observación. Esta vez, las observaciones fueron llevadas a cabo en seis lugares, de los cuales cuatro lugares las mediciones fueron hechas en forma exitosa, y fueron San Lorenzo ($L=211\text{km}$), Villa Elisa ($L=214,5\text{km}$), Caacupé ($L=215\text{km}$) y Cerro Corá ($L=89,3\text{km}$). Datos de Itauguá ($L=209\text{km}$) y de Villa Florida ($L=321,8\text{km}$) no fueron adoptados por

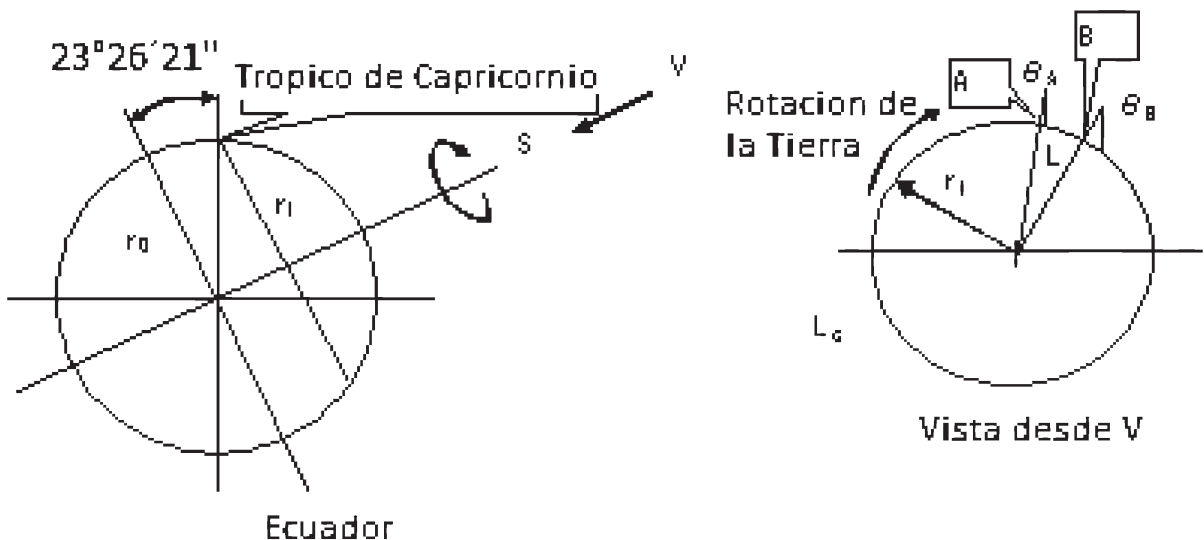


Fig. 2. Cálculo de la circunferencia ecuatorial.

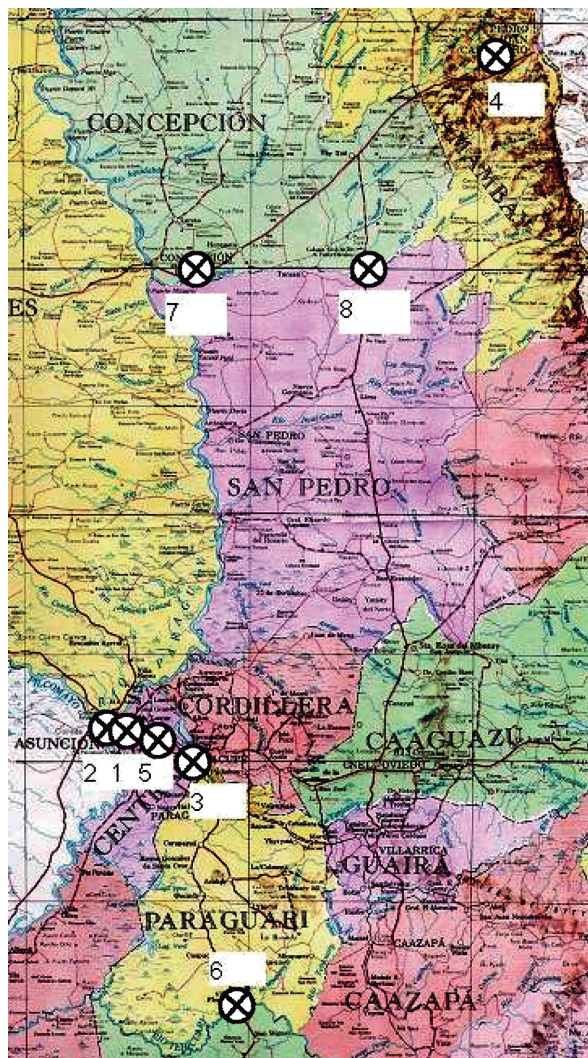


Fig. 3. Lugares de Observación: 1) San Lorenzo; 2) Villa Elisa; 3) Caacupé; 4) Cero Corá; 5) Itauguá; 6) Villa Florida; 7) Belén; 8) Ypané.

problemas de ingeniería.

Por otra parte, para medir la circunferencia ecuatorial, las observaciones se tuvieron que llevar a cabo en dos puntos sobre la línea del trópico de Capricornio al mismo tiempo alrededor del mediodía. Los lugares de observación fueron (a) cerca del río Ypané sobre la ruta N° 3 (23d26'21' S 56d29'28.38" W, este lugar será referenciada como Ypané) y (b) en el patio de un granjero en la ciudad de Belén (23d26'21' S 57d16'03.64" W). Estos dos puntos fueron ubicados utilizando un GPS, y la distancia entre ellos fue 79,44km

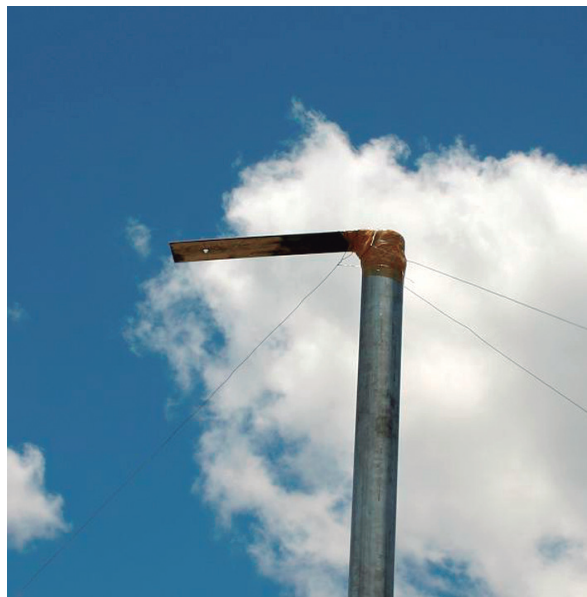


Fig. 4. Agujero de 8 mm (Ypané).

sobre el trópico de Capricornio. Estos dos puntos pueden ser vistos en la Figura 3.

En el estudio de la factibilidad para medir la sombra, hemos encontrado que una abertura (hueco) es mejor que utilizar un ángulo sólido para encontrar el punto de la sombra. Por lo tanto láminas de hierro los cuales tienen un agujero de aproximadamente 8 mm de diámetro y 3 mm de espesor fueron usados. Las láminas de hierro fueron fijadas a una determinada vara de aproximadamente 3 metros de altura (Fig. 4). El punto justo por debajo del agujero fue localizado utilizando una plomada

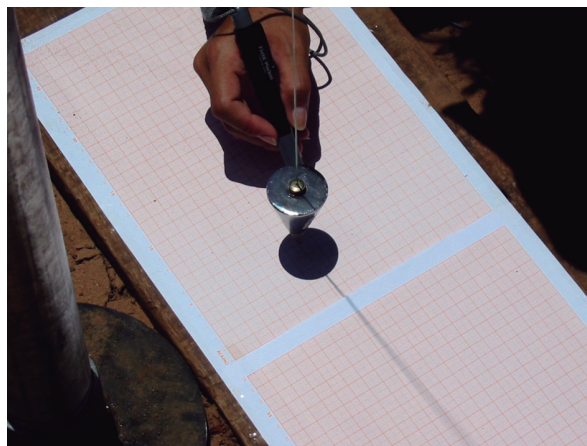


Fig. 5. Encontrando el punto justo por debajo del agujero (Belén).



Fig. 6. Registro del centro del agujero (Ypané, Freddy Doncel).

de forma triangular (Fig. 5).

El paso del Sol por el meridiano fueron calculados de antemano para cada punto de observación y las observaciones fueron realizadas por mas ± 10 min del tiempo de paso por el meridiano. En la observación fue registrado el centro del brillo del agujero circundado en papel milimétrico (Fig.6).

Circunferencia de la Tierra

1. Circunferencia del meridiano

La Tabla 1 muestra los resultados de la observación en cuatro lugares. Villa Elisa y Cerro Corá no fueron observados durante el solsticio, 22 de diciembre de 2005, pero el cálculo teórico la diferencia de altitud del Sol entre diciembre 18 y diciembre 22 es menos de 0,1 grados. Así que los datos fueron considerados como los mismos datos tomados el 22 de diciembre.

Nota 1: A 10001,97km (UAI 1976) es usado como el meridiano cuadrante de la Tierra. Por lo tanto la circunferencia del meridiano teórico es usado como 400078,88km.

Nota 2: Observadores:

Villa Elisa: Takashi Momiyama y Noriko Momiyama.
San Lorenzo: Vincent Figueres.
Caacupé: Jose M. Gómez.
Cerro Corá: Takashi Momiyama y Toshiko Sekine.

Comparando la circunferencia observada con la circunferencia del meridiano teórico de la Tierra, el error estuvo entre -0,15% y 0,77%. Hemos obtenido resultados satisfactorios.

Lugar	Villa Elisa	San Lorenzo	Caacupé	Cerro Cora
Fecha de observación	Dec.18, 2005	Dec.22, 2005	Dec.22, 2005	Dec21, 2005
Distancia desde el trópico de Capricornio (km)	214.5	211	215	89.3
Longitud mínima de la sombra (cm)	7.5	10.1	9.6	2.05
Altura de la vara (cm)	222.5	300	284	145
Angulo de la sombra (deg)	1.93	1.93	1.94	0.81
Circunferencia de la Tierra observada (km)	39998.19	39393.65	39978.89	39698.28
Error (%) Nota 1	-0.02	-1.54	-0.07	0.77
Observadores	Nota 2	Nota 2	Nota 2	Nota 2

Tabla 1. Circunferencia del meridiano de la Tierra.

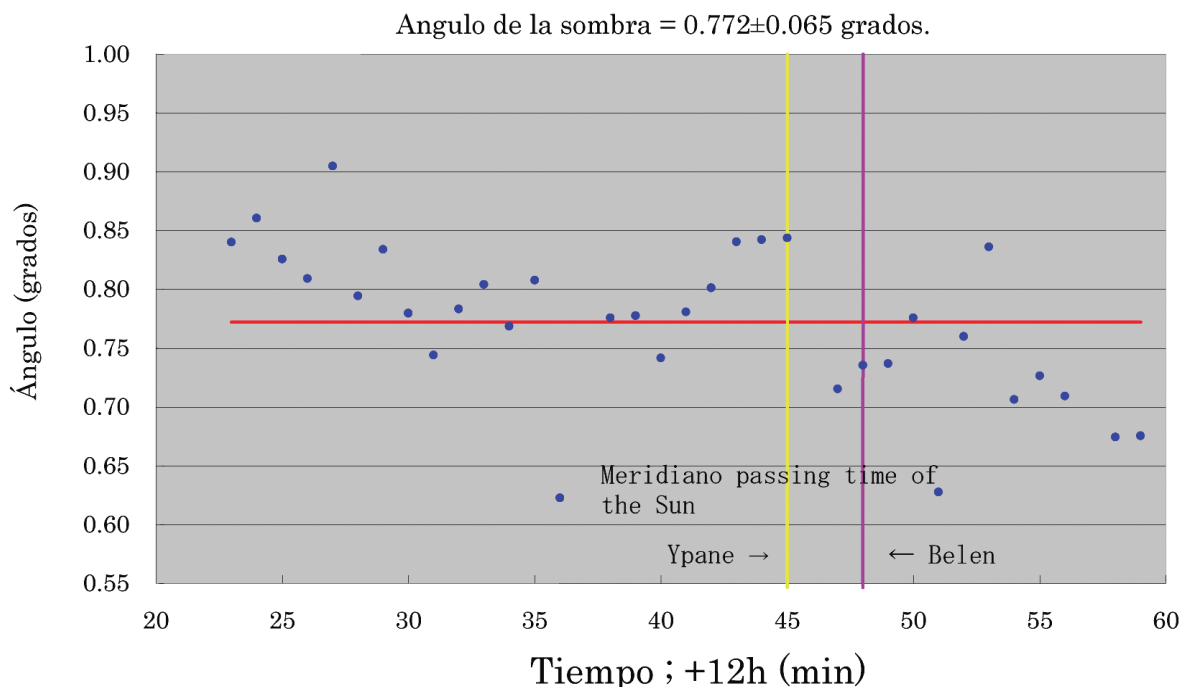


Fig. 7. Diferencia de ángulo entre Belén e Ypané.

2. Circunferencia ecuatorial

La Fig. 7 muestra los resultados de las observaciones del ángulo de la sombra del Sol entre Belén e Ypané. En el eje de las X se muestra el tiempo local en minutos de Paraguay adhiriendo 12 horas. El tiempo del paso por el meridiano predécido en Ypané fue 12h45m y en Belén fue de 12h48m. Y en el eje Y se muestra el ángulo el cual es la diferencia entre Ypané y Belén.

La tabla 2 muestra los resultados de las observaciones en el Trópico de Capricornio. El promedio de la diferencia de ángulo fue de 0.772 ± 0.065 grados, por lo tanto la circunferencia del ecuador calculado fue de 39778,73km. El error fue de -0,74% comparado al valor teórico de la circunferencia del meridiano terrestre.

La Fig. 8 muestra la diferencia de ángulo por minuto para cada punto de observación. En el eje de las X esta el valor del tiempo local en minutos al cual se le adhiere 12 h y 0,5 minutos. El significado de 0,5min es que la diferencia de ángulo es la sustracción como $\theta(t+1) - \theta(t)$. Donde θ es el ángulo de la sombra en el tiempo $t+1$ o t . Entonces

la diferencia de ángulo fue graficado en el eje Y en $t+0.5$ min. del eje X. En Ypané fueron hechas por una sola persona, por lo que la desviación estándar fue más pequeña que la de Belén donde las observaciones fueron hechas por varias personas alternadamente. A pesar de la desviación estándar diferente, en promedio fueron casi lo mismo por tanto el promedio del ángulo de la sombra es de confianza.

Nota 1: El radio del Ecuador es 6378.14 km (UAI 1976). Entonces la circunferencia teórica del ecuador llega a ser 40075.05 km.

Nota 2: Observadores:

Belén: Takashi Momiyama, Carlos Gonzalez, Yukiko Honma, Seiko Fujita, Yoshiko Kametaya, Yuuko Namura y Hanako Iwashita.

Ypané: Fredy Doncel, Toshihiko Sekine, Yoriko Takahashi, Yumi Sasaki, y Emi Heianji.

Diferencia de angulo de la sombra (deg)	Promedio	0.772
	Desv. Std.	0.065
La circunferencia del trópico de Capricornio (km)		37026.29
El radio del trópico de Capricornio (km)		5892.92
El radio del ecuador (km)		6330.98
La circunferencia del ecuador (km)		39778.73
Error de la observación (%) Nota 1		-0.74
Observadores		Nota 2

Tabla 2. Los resultados de la observación sobre el trópico Capricornio.

CONCLUSIÓN

En el solsticio de verano del 22 de diciembre de 2005, fue observada la sombra del Sol desde varios lugares de l Paraguay. La circunferencia del meridano de la Tierra fue calculada por el Método de Eratóstenes y ha derivado en un error menor a 1,57%. También fue calculada la circunferencia del ecuador terrestre a partir de la diferencia angular de la sombra entre dos lugares de sobre el trópico de Capricornio y el error fue de 0,74%. Esta observación fue la primera experiencia en

Paraguay.

El método de Eratóstenes es muy sencillo y la circunferencia terrestre es calculada a partir de una matemática muy básica. Este tipo de observación puede ser una muy buena experiencia no solamente para estudiantes universitarios sino también para estudiantes de nivel secundario. Una sugerencia importante para la observación es localizar el punto exacto bajo la sombra y no mover el papel de registro durante la observación. Todo el resto depende de las condiciones climáticas.

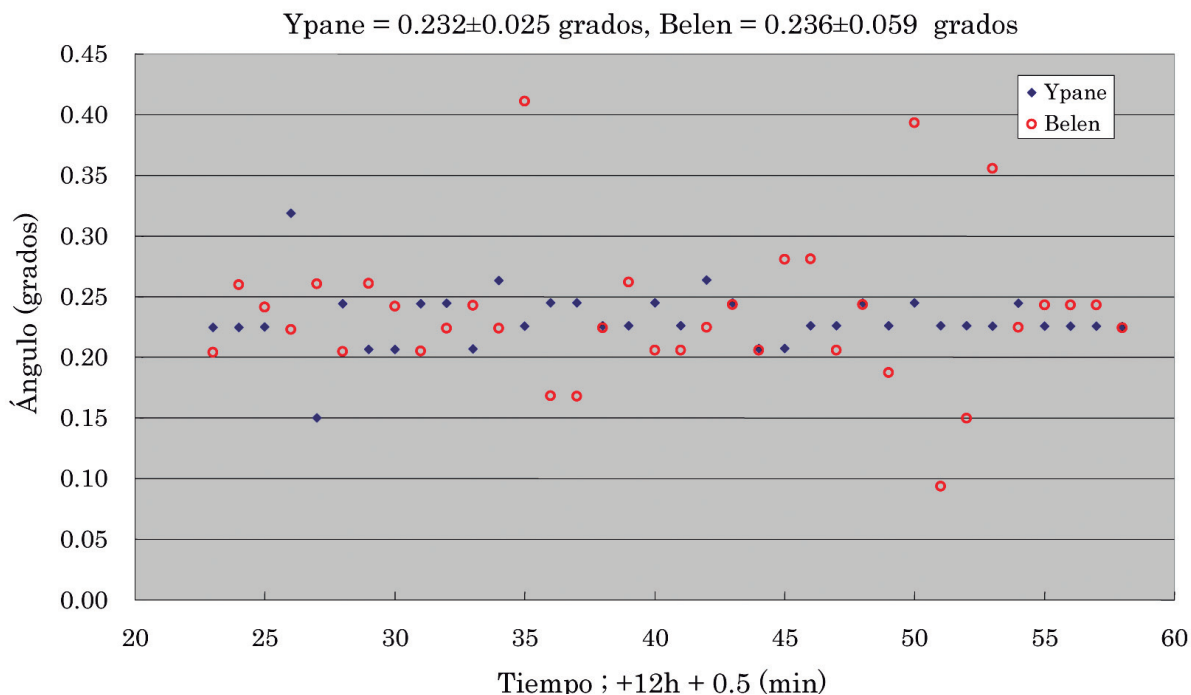


Fig. 8. Diferencia de ángulo por minuto.

BIBLIOGRAFÍA

- GAMOW, G. 1988. One two three... infinity: GAMOW G., 1988, One two three... infinity: facts and speculations of science. Dover Publications, Inc., New York. 352 pp.
- NATIONAL ASTRONOMICAL OBSERVATORY OF JAPAN. 2004, Chronological Scientific Tables. Maruzen Co. Ltd., Japan.

PROCESOS DE RAMIFICACIÓN: UNA APLICACIÓN EN LA POBLACIÓN AMERICANA**BRANCHING PROCESSES: AN APPLICATION TO THE AMERICAN POPULATION**FERNANDO GIMÉNEZ SENA¹ & XAVIER BORDINA I SIMORRA²¹Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Asunción, Paraguay. Email: ferdisena@facen.una.py²Universidad Autónoma de Barcelona España

Resumen: La teoría de los procesos de ramificación son utilizadas en diversas áreas de aplicación. En particular la biología para sus estudios de la evolución de poblaciones biológicas de cualquier naturaleza; y más específicamente, en el estudio de la evolución de poblaciones humanas. En este trabajo se revisan conceptos básicos para caracterizar estos procesos, y se estudian las funciones generatrices de probabilidades para derivar resultados sobre la evolución y extinción de poblaciones en términos de procesos de ramificación. Un ejemplo aplicado a la población americana ilustrará los conceptos estudiados.

Palabras clave: *Función generatriz de probabilidades, Procesos de ramificación.*

Abstract: Branching process theory has several applications. In particular, biology has use of it to study population evolution of any type, specifically in studies of human populations. This work reviews the basic concepts that characterize these processes, and studies the probability generating functions which are useful for the development of results that are further applied to get results on evolution and extinction of populations in terms of branching processes. An example for an american population is presented to illustrate the reviewed theory.

Keywords: *Probability generating function, Branching processes.*

INTRODUCCIÓN

La biología tiene un lugar especial dentro de las ciencias naturales ya que las unidades biológicas, porciones de ADN, células, u organismos, se reproducen con mayor o menor eficacia. Los procesos de ramificación juegan un papel importante tanto en la biología teórica y en la aplicada, en particular en los estudios de la variación, crecimiento y extinción de poblaciones; esta teoría es singularmente útil como herramienta matemática para comprender y representar el proceso biológico de la reproducción que tiene un gran componente aleatorio.

La teoría permite hacer predicciones con relación a los riesgos de extinción y al desarrollo de la composición de la población, y además descubre aspectos de la historia de la población a partir de alguna configuración inicial. En este campo

los procesos de ramificación tienen una creciente importancia en el modelado genético, la biología molecular, la microbiología, ecología y la teoría de la evolución. Haccou et al. (2005), Theodorou y Couvet (2006) y Bennewitz J. y Meuwissen T. H. E. (2005).

El tema se desarrolla con una introducción en la sección 1. La sección 2 se ocupa de los conceptos de Función Generatriz de Probabilidades, para variables aleatorias discretas; seguida de la sección 3 donde esta función es expandida como una serie de potencias y se conecta con el valor esperado de una variable aleatoria. En la siguiente sección se presenta el Proceso de Ramificación básico, en el marco de los procesos poblacionales, y analizamos su evolución y extinción. Finalmente es presentado un ejemplo, seguido de algunas consecuencias derivadas de los conceptos estudiados.

FUNCIÓN GENERATRIZ DE PROBABILIDADES

Las funciones generatrices son ampliamente utilizadas en matemática y juegan un rol muy importante en la teoría de probabilidades; en este capítulo se revisarán los conceptos básicos y serán derivadas algunas propiedades principales, particularmente en matemática discreta y análisis combinatorio, Esquivel M. (2004), Lando S. K. (2003). Es un método muy potente para encontrar la distribución de probabilidad de sumas de dos o más variables aleatorias independientes discretas.

Algunas referencias, en el cálculo para variables aleatorias con valor discreto en probabilidad básica en Feller W. (1968); como valor esperado de una variable aleatoria en Hoffman-Jørgensen (1997); en la construcción de modelos probabilísticos: para testar modelos Poisson en Nakamura et al. (1993a); pruebas de ajuste para distribuciones discretas en Rueda et al. (1999); para encontrar distribuciones mixtas en Villa y Escobar (2006); se encuentran además aplicaciones en economía Nakamura et al. (1993b) y en modelos de choques (shock models), Roychoudhury y Bhattacharjee (2006); y así en muchos otros campos.

2.1. Función Generatriz de Probabilidades

Esta función es una herramienta matemática y por tanto es de difícil imaginación pues no corresponde a un concepto directamente observable. Formalmente es una serie de potencias, que en un contexto probabilístico representa a una función generatriz de probabilidades. Estas funciones tienen propiedades interesantes y con frecuencia reducen en gran medida el esfuerzo que implica analizar una distribución de probabilidad. El punto importante a notar es que, para variables discreta, el coeficiente del desarrollo en series es la probabilidad de que la variable aleatoria tome un valor específico.

Definición 1. Función generatriz:

Sea una sucesión $\{a_i, i = 0, 1, 2, \dots\}$ con $a_i \in \mathbb{R}$ La función,

$$G(s) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i s^i \quad (1)$$

donde s es tal que la suma converge, se llama *función generatriz*.

Para una serie dada, existe $R \geq 0$ (estrictamente mayor que cero), tal que si $|s| < R$ la suma converge; mientras que si $|s| > R$ la suma diverge o toma valores discretos no negativos.

Definición 2. Probabilidad de una variable aleatoria. Sea una variable aleatoria discreta X con valores en $\mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$, esto es, solo toma valores discretos no negativos. Entonces, la probabilidad de que la variable aleatoria, tome un valor particular k , se denota como $p_k = P(X = k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ y es tal que

1. $p_k \geq 0$.
2. $\sum p_k = 1$ la suma sobre todo el conjunto de valores k posibles.
3. Para un conjunto de valores de k ; $k_1, k_2, \dots$, se cumple que la probabilidad que la variable tome el valor k_1 , o tome el valor k_2 , y así sucesivamente, ... está dado por $p_{k_1} + p_{k_2} + \dots$

Valores de k que no pueden ocurrir tienen asignada probabilidad nula.

Definición 3. Función Generatriz de Probabilidades de una Variable Aleatoria Discreta, es la función,

$$G_x(s) = \sum_{k=0}^{\infty} s^k p_k = E(s^k) \quad (2)$$

siempre que la suma esté definida y sea finita se denomina *Función generatriz de probabilidades de la variable aleatoria discreta X* . El dominio de definición es un subconjunto de los reales, esto es $D_x \subset \mathbb{R}$, y el recorrido el conjunto de los reales.

La serie puede descomponerse en, $G_x(s) = P(X=0) + \sum_{k=1}^{\infty} s^k p_k$; haciendo $s=0$, y como el primer término de la sumatoria no depende de s , se obtiene que $G_x(0) = P(X=0) = p_0$.

Similarmente, haciendo $s=1$, resulta la expresión siguiente, $G_x(1) = \sum_{k=0}^{\infty} 1^k p_k = \sum_{k=0}^{\infty} p(X=k) = 1$; de modo que la serie converge absolutamente para $|s| \leq 1$.

Por otra parte, cuando $s \neq 0$ se obtiene, $G_x(s) = \sum_{k=0}^{\infty} s^k P(X=k) = E(s^k)$.

2.2. Algunos ejemplos de FGP

Vemos algunos ejemplos de funciones generatriz de probabilidades para variables aleatorias que siguen ciertas leyes de distribución conocidas.

Distribución Uniforme

Sea una variable aleatoria con función distribución de probabilidad igual a $P(X=k) = 1/n$ con $k=1,2,\dots,n$. Su función generatriz está dada por, $G(s) = 0s^0 + \frac{1}{n}s^1 + \frac{1}{n}s^2 + \frac{1}{n}s^3 + \dots + \frac{1}{n}s^n$.

Distribución Binomial

Para la ley Binomial, el conjunto de probabilidades está proporcionado por su distribución de probabilidad, que tiene ecuación dada por $P(X=k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$ con $k=0,1,\dots,n$; su función generatriz está dada por el desarrollo de $((1-p)+ps)^n$, que luego de un poco de álgebra tiene forma, $G(s) = ((1-p)+ps)^n$.

La primera y segunda derivadas respectivamente son, $G^{(1)}(s) = n((1-p)+ps)^{n-1} p$; $G^{(2)}(s) = n(n-1)((1-p)+ps)^{n-2} p^2$.

Consecuentemente, $G(1) = ((1-p)+p)^n = 1$,

$$G^{(1)}(1) = n((1-p)+p)^{n-1} p = np = E(X);$$

$$G^{(2)}(1) = n(n-1)((1-p)+p)^{n-2} p^2 = n(n-1)p^2.$$

Distribución Poisson

Una variable aleatoria discreta X , tiene distribución Poisson con parámetro λ , si su función de distribución de probabilidad está dada por, $P(X=k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}$ con $k=0,1,2,\dots$. Es útil para modelar el número de ocurrencias de un evento en un intervalo de tiempo cuando el promedio de ocurrencias es λ .

Su función generatriz está dada por,

$$G_x(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \lambda^k e^{-\lambda} s^k = e^{\lambda(s-1)} = E(s^k) \text{ con}$$

$$G(1) = e^{\lambda} e^{-\lambda} = 1; \text{ resultando}$$

$$G^{(1)}(1) = \lambda e^{\lambda} e^{-\lambda} = \lambda = E(X).$$

2.3. FGP y Leyes de Probabilidad

Vemos a continuación como la función generatriz de probabilidades puede ser utilizada para encontrar la ley de probabilidad que sigue una variable aleatoria discreta específica.

La FGP determina la ley de probabilidad de una variable aleatoria. El siguiente teorema muestra como es posible determinar la ley de probabilidad de una variable aleatoria discreta por medio de la función generatriz de probabilidades.

Teorema 2.1. *Dada una variable aleatoria discreta X . Su distribución de probabilidad está determinada por su función generatriz de probabilidades, donde la distribución de probabilidad viene dada por,*

$$P(X=k) = \frac{G_x^{(k)}(0)}{k!} \forall k \geq 0 \quad (3)$$

Donde $G_x(s)$ es la función generatriz de probabilidades de X ; $G_x^{(k)}(0)$ es la k -ésima derivada de la FGP evaluada en el punto $s=0$.

Teorema de Unicidad

Este teorema expresa que dos variables aleatorias diferentes que tienen la misma función generatriz de probabilidades, tienen necesariamente la misma ley de probabilidad.

Teorema 2.2. Teorema de Unicidad

Sean X e Y variables aleatorias discretas con Función Generatriz de Probabilidad $G_x(s)$ y $G_y(s)$ respectivamente. Entonces, $G_x(s) = G_y(s)$ si y solo si $P(X=k) = P(Y=k)$ con $k=0,1,2,\dots$ en otras palabras, dos funciones generatrices de probabilidades coinciden si y solo si tienen la misma distribución de probabilidad.

Los teoremas previos pueden extenderse con facilidad a funciones de variables aleatorias; en general para $Y=f(X)$, la función generatriz de probabilidades toma la siguiente forma,

$$G_Y(s) = G_{f(X)}(s) = E(s^{f(X)}) = \sum_{k=0}^{\infty} s^{f(k)} P(X=k).$$

En particular, para $Y = a + bX$, resulta:

$$G_Y(s) = G_{a+bX}(s) = E(s^{a+bX}) = E(s^a s^{bX}) = s^a E[(s^b)^X].$$

En consecuencia,

$$G_Y(s) = s^a G_X(s^b) \quad (4)$$

2.4. Momentos

Una forma elegante de calcular el valor esperado utilizando las derivadas de la función generatriz de probabilidades esta dada por el siguiente teorema. En los cursos introductorios es costumbre utilizar un tedioso procedimiento para encontrar la varianza de la distribución binomial que justamente utiliza $E[X(X-1)]$ como punto de partida.

Teorema 2.3. *Dada una variable aleatoria discreta X .*

Sea $G_X^{(r)}(1)$ la r -ésima derivada de la FGP evaluada en el punto $s = 1$. Entonces,

$$G_X^{(r)}(1) = E[X(X-1)\dots(X-r+1)] \quad (5)$$

A continuación se deducen expresiones para la media y la varianza de una variable aleatoria discreta X utilizando el teorema anterior.

- Caso: $r = 1$

$$G_X^{(1)}(s) = \frac{d}{ds} \left[\sum_{k=0}^{\infty} s^k P(X=k) \right] = \sum_{k=0}^{\infty} k s^{k-1} P(X=k)$$

que evaluado en $s = 1$ proporciona una expresión para el valor esperado de la variable aleatoria, $G_X^{(1)}(1) = \sum_{k=0}^{\infty} k P(X=k) = E(X)$.

- Caso: $r = 2$

A evaluar la segunda derivada en $s = 1$ se tiene,

$$G_X^{(2)}(s) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) P(X=k) = E[X(X-1)] = E(X^2 - X)$$

pero es sabido que la varianza de una variable aleatoria está dada por $V(X) = E(X^2) - [E(X)]^2$; por lo que sumando y restando $[E(X)]^2$ resulta,

$$G_X^{(2)}(1) = E(X^2) - E(X) + [E(X)]^2 - [E(X)]^2$$

agrupando términos convenientemente,

$$G_X^{(2)}(1) = E(X^2) - [E(X)]^2 - E(X) + [E(X)]^2$$

donde los dos primeros términos del se-

gundo miembro corresponden a la varianza de X , por lo que despejando se obtiene,

$$V(X) = E(X^2) - [E(X)]^2 = G_X^{(2)}(1) - [E(X)]^2 + E(X)$$

y poniendo en términos de las derivadas de las funciones generatriz de probabilidades produce la expresión buscada para la varianza,

$$V(X) = G_X^{(2)}(1) - [G_X^{(1)}(1)]^2 + G_X^{(1)}(1).$$

2.5. Suma de dos variables aleatorias independientes

Los siguientes resultados serán necesarios para desarrollar las ideas básicas de los procesos de ramificación; los mismos conciernen a la función generatriz de probabilidades de sumas de variables aleatorias independientes.

Teorema 2.4. *Sean X e Y variables aleatorias independientes; ambas variables representan conteos independientes. $G_X(s)$ y $G_Y(s)$ son sus respectivas funciones generatrices de probabilidades.*

Entonces,

$$G_{X+Y}(s) = G_X(s) G_Y(s) \quad (6)$$

El teorema previo es fácilmente generalizado para n variables aleatorias independientes $X_1, X_2, \dots, X_n$, siendo $G_{X_1}(s), G_{X_2}(s), \dots, G_{X_n}(s)$ las respectivas funciones generatrices de probabilidades. Esto es, para, su función generatriz de probabilidades esta dada por,

$$G_Z(s) = \prod_{i=1}^n G_{X_i}(s) \quad (7)$$

2.6. Suma de un número aleatorio de variables aleatorias independientes

Cuando el número de variables aleatorias es también aleatoria, a diferencia del teorema anterior en el que este número es fijo, el Teorema de Composición con respecto a los parámetros indica un procedimiento para determinar la correspondiente función generatriz de probabilidades.

Teorema 2.5. *Composición con respecto a los parámetros*

Sean $N, X_1, X_2, \dots$ variables aleatorias que representan conteos independientes tales que las X_i

están idénticamente distribuidas, y tienen igual función generatriz de probabilidades $G_X(s)$

Si $S_N = X_1 + X_2 + \dots + X_N$ representa la suma de un número aleatorio N de variables aleatorias, entonces su función generatriz de probabilidades está dada por,

$$G_{S_N}(s) = G_N[G_X(s)] \quad (8)$$

Si $N=0$, por convención se define $S_N = X_1 + X_2 + \dots + X_N = 0$.

Para finalizar esta sección obtenemos expresiones para la esperanza y varianza de sumas de un número aleatorio de variables aleatorias independientes.

1. Esperanza de S_N

Sea $G_{S_N}(s)$ la función generatriz de probabilidades de S_N ; derivando con respecto a su argumento resulta, $\frac{d}{ds}[G_{S_N}(s)] = \frac{d}{ds}[G_N(G_X(s))]$ haciendo $u(s) = G_X(s)$, resulta $\frac{d}{ds}[G_{S_N}(s)] = \frac{d}{du}[G_N(u)] \frac{du}{ds}$ haciendo $s=1$ se tiene el resultado conocido $u = G_X(1) = 1$; en consecuencia la expresión anterior toma la forma, $E(S_N) = [G_N^{(1)}(1)][G_X^{(1)}(1)]$ finalmente se obtiene,

$$E(S_N) = E(N)E(X) \quad (9)$$

2. Varianza de S_N

A continuación se comprueba que la varianza de una suma de un número aleatorio de variables aleatorias independientes está dada por,

$$V_{S_N}(s) = E(N)V(X) + V(N)(E(X))^2 \quad (10)$$

En efecto, como $G_{S_N}(s) = G_N[G_X(s)]$ con primera derivada $\frac{d}{ds}[G_{S_N}(s)] = \frac{d}{du}[G_N(u)] \frac{du}{ds}$, y $u = G_X(s)$ la segunda derivada resulta, $\frac{d^2}{ds^2}[G_{S_N}(s)] = \frac{d^2}{du^2}[G_N(u)] \frac{du}{ds} \frac{du}{ds} + \frac{d}{du}[G_N(u)] \frac{d^2u}{ds^2}$ evaluando en $s=1$ y recordando que $\frac{d^2}{ds^2}[G_X(s)] = E[X(X-1)]$ se tiene, $E[S_N(S_N-1)] = E[N(N-1)]E(X)E(X) + E(N)E[X(X-1)]E(S_N^2) - E(S_N) = [E(N^2) - E(N)](E(X))^2 + E(N)[E(X^2) - E(X)]$ sumando y restando al primer miembro la expresión $(E(S_N))^2$

luego, al primer término del segundo miembro se suma y resta $(E(N))^2$ a continuación, al segundo término del segundo miembro se suma y resta $(E(X))^2$ finalmente, luego de ordenar convenientemente, cancelar términos, utilizar el hecho que $E(S_N) = E(N)E(X)$ y la definición de varianza $V(S_N) = (E(S_N))^2 - (E(S_N))^2$ se llega a la expresión buscada.

PROCESOS DE RAMIFICACIÓN

El término “procesos de ramificación” es acuñado por Kolmogorov en Rusia. Según Jagers (2009), estos procesos se remontan al estudio de la evolución de los nobles y la extinción de familias realizado por De Candolle y Bienaymé; sin embargo, inicialmente se atribuyó el origen en un problema propuesto, 28 años más tarde, por Francis Galton, notablemente un biólogo, quien en el año 1873 publica en el Educational Times el Problema 4001, con el cual se da inicio a la teoría moderna. El problema plantea encontrar en una población, la proporción de apellidos extinguidos luego de transcurrir una cantidad de generaciones. Citado por Kendall (1966).

El primer intento de solución fue dado por el reverendo H.W. Watson, quien debido a un error algebraico concluyó equivocadamente que un apellido se extinguirá con probabilidad 1. Sin embargo sus métodos fueron correctos y constituyen las bases para llegar a la solución correcta. Watson determinó que la probabilidad de extinción es un punto fijo de la función reproductiva. Afirmó que 1 es siempre tal punto fijo, y a partir de esto concluye con Galton que “todos los apellidos tienden a desaparecer en un tiempo indefinido”. Si bien Bienaymé dio la respuesta correcta antes que Galton, Heyde C. C. y Seneta E. (1977), la corrección se realiza 50 años más tarde.

El planteamiento es conocido como el problema de Galton-Watson; y la solución plantea el conteo de generaciones que no se superponen en el transcurrir del tiempo.

El británico J. Haldane, químico, fisiólogo,

estadístico genetista, y escritor político obtiene resultados correctos que son formulados por Steffensen 1930 en la siguiente forma “Si el número medio de criaturas es menor o igual que uno, entonces Galton y Watson estaban en lo cierto; pero si excede uno, entonces existe otro punto fijo menor, que proporciona la correcta probabilidad de extinción”;

Más adelante, en torno a 1968, el desarrollo de la teoría de procesos puntuales permite la formulación del proceso de ramificación general en el cual los individuos dentro de la población pueden procrear en forma repetida, en una cadena de eventos que forman un proceso puntual posiblemente de varios tipos.

Durante todo este tiempo el marco conceptual lo constituía la teoría de poblaciones estables, la cual es una teoría determinística, aunque a partir de los modelos de ramificación general son posibles enfoques de tipo aleatorio que proporcionan interpretaciones ampliadas de los conceptos clásicos.

En la actualidad los desafíos de los procesos de ramificación en el campo de la evolución se relacionan con la teoría de la dinámica de poblaciones estructuradas y la dinámica adaptativa, en particular estudiando como pequeñas mutaciones sucesivas pueden conducir a nuevas especies y a su coexistencia.

3.1. Conceptualización

Se denomina Proceso de Ramificación en tiempo discreto a un tipo de Cadena de Markov en tiempo discreto con espacio de estados finitos. A este tipo de modelos cada miembro o individuo de la población desaparece en el momento de producir la siguiente generación. Siguiendo los delineamientos de Bardina (2008), se especifica a continuación el modelo a considerar.

X_n es el número de individuos que una cierta población tiene en la n -ésima generación. Cada individuo, por ejemplo el k -ésimo de los X_n existentes aporta $Z_{n+1}^{(k)}$ descendientes a la generación siguiente.

Las condiciones supuestas son,

1. El número de descendientes que cada individuo de la generación actual aporta a la siguiente generación es independiente del número de individuos que existen en la presente generación. Esto es, cada $Z_{n+1}^{(k)}$ es independiente de X_n .
2. El número de descendientes aportado por cada individuo de la generación actual son independientes entre si. Es decir, las $Z_{n+1}^{(k)}$ son mutuamente independientes.
3. La distribución de probabilidad del número de descendientes aportado por cada individuo de la generación actual a la siguiente es la misma para todos los individuos. En otras palabras, $Z_{n+1}^{(k)}$ son variables aleatorias idénticamente distribuidas.
4. El número de descendientes de un individuo es una variable aleatoria discreta con valores enteros no negativos.

$$Z_{n+1}^{(k)} = 0, 1, 2, \dots$$

5. En la primera generación, o generación 0, solo existe un individuo. $X_0=1$

Dada la n -ésima generación, X_{n+1} describe el número de individuos que existen en la generación $n+1$. Esto es,

$$X_{n+1} = \sum_{k=1}^{X_n} Z_{n+1}^{(k)} \quad (11)$$

Si la generación previa no produjo descendientes, consecuentemente la suma resulta cero.

A continuación, primero se presenta como evoluciona la población a lo largo del tiempo, y luego la probabilidad de que una población dada se extinga en un momento dado.

3.2. Evolución de la población

Sea $Z_{n+1}^{(k)}$ una variable aleatoria que representa el número de individuos que el miembro k de la generación actual aporta a la siguiente generación. Su función de probabilidad se denota por $P(Z_{n+1}^{(k)} = z)$ con $z = 0, 1, 2, \dots$; y función generatriz de probabi-

lidades dada por, $G_{Z_{n+1}^{(k)}}(s) = \sum_{k=0}^{\infty} s^k P(Z_{n+1}^{(k)} = k)$.

Se puede decir que $Z_{n+1}^{(k)}$ es el tamaño de la k -ésima familia.

La sucesión $X_0, X_1, X_2, \dots$ representa entonces la evolución de la población a medida que van sucediéndose las generaciones. Este proceso puede ser estudiado utilizando las funciones generatrices de probabilidades. Como las $Z_{n+1}^{(k)}$ son supuestas independientes e idénticamente distribuidas, las respectivas funciones generatrices serán las mismas y se representarán por $G_Z(s)$.

Y como $X_{n+1} = \sum_{k=1}^{X_n} Z_{n+1}^{(k)}$ su FGP está dada por:

$$G_{X_{n+1}}(s) = \sum_{k=0}^{\infty} s^k P(X_{n+1} = k) \quad (12)$$

En la generación de partida, esto es $n=0$, y como, $P(X_0=1)=1$ y $P(X_0=k)=0$ para $k \neq 1$ se obtiene, $G_{X_0}(s) = s^0 P(X_0=0) + s^1 P(X_0=1) + \sum_{k=2}^{\infty} s^k P(X_0=k) = s$

Además, $G_{X_1}(s) = G_Z(s)$.

En lo que sigue la notación será, $X_n = Z_1 + Z_2 + \dots + Z_{X_{n-1}}$ donde Z_k representa la cantidad de descendientes que tiene k -ésimo individuo de la generación $(n-1)$.

X_n es suma de un número aleatorio de variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas.

En los cálculos a realizar se utilizará el hecho que:

$$G_n(s) = G_{n-1}[G(s)], \quad n = 2, 3, \dots$$

De la relación se deduce que,

$$G_n(s) = G_{n-2}[G(G(s))] = \dots = \underbrace{G_1[G(G(\dots(s)))]}_{n-1} = \underbrace{G[G(G(\dots(s)))]}_n$$

Esta expresión indica que la función generatriz de probabilidades es la composición con la función generatriz de la generación anterior, y así sucesivamente hasta la generación inicial.

1. Valor esperado de X_n

$$E(X_n) = \mu^n \quad (13)$$

Cuando n tiende a infinito, el valor esperado tiende a 0 cuando $\mu < 1$; por otro lado, si $\mu > 1$ el valor esperado crece hacia infinito; y finalmente si $\mu = 1$, el valor esperado se mantiene constante igual a 1. A este último valor se denomina valor crítico.

2. Varianza de X_n

La varianza del tamaño de una generación dada, por ejemplo n .

Cuando $\mu = 1$, designando $\sigma^2 = V(Z)$

$$V(X_n) = n\sigma^2 \quad (14)$$

Cuando $\mu \neq 1$

$$V(X_n) = \sigma^2 \mu^{n-1} \frac{\mu^n - 1}{\mu - 1} \quad (15)$$

3.3. Probabilidad de extinción

La determinación utiliza procedimientos de condicionamiento, además de los conceptos y propiedades de la función generatriz de probabilidades. La solución depende del conocimiento de la distribución común de las $Z_n^{(k)}$.

Formalmente se busca encontrar, para algún $n \in \mathbb{N}$, $\rho = P\{\exists n: X_n = 0\} = P\left[\bigcup_{n=1}^{\infty} \{X_n = 0\}\right]$.

Teorema 3.1. Sea G_Z la común función generatriz de probabilidades de las $Z_n^{(k)}$.

Entonces, ρ satisface la ecuación, $\rho = G_Z(\rho)$
Es decir, ρ es un punto fijo de la función generatriz de probabilidades G .

Como para cualquier variable aleatoria X , $G_X(1) = \sum_{k=0}^{\infty} 1^k P(X=k) = 1$, entonces el valor 1 siempre es un punto fijo.

El problema consiste en determinar si 1 es o no la solución que interesa. La respuesta a esta cuestión la proporciona el teorema siguiente, que brinda las condiciones para determinar si $\rho = 1$ es la solución buscada o no.

Teorema 3.2. Dado $P(Z_n^{(k)} = 0) > 0$ Se tienen las siguientes posibilidades,

1. Si $E[Z_n^{(k)}] \leq 1$ entonces, $\rho=1$.
2. Si $E[Z_n^{(k)}] > 1$ entonces, $\rho \in (0,1)$; además $\rho > 0$.

UN EJEMPLO EN LA POBLACIÓN AMERICANA

Estudios realizados sobre la población americana han demostrado que es posible suponer que la probabilidad $P(n)$ de que una familia tenga exactamente n hijos está dada por,

$$P(n) = \alpha p^n \quad P(0) = 1 - \alpha(p + p^2 + p^3 + \dots) \quad (16)$$

donde α y p son reales positivos, $n = 0, 1, 2, \dots$ y además $p < 1$, $1 + \alpha \leq 1/p$.

Notar que la condición $1 + \alpha \leq 1/p$ se cumple pues,

$$P(0) = 1 - \alpha(p + p^2 + p^3 + \dots) \geq 0$$

por la definición de probabilidad, y porque $\alpha > 0$ y $p > 0$, y que también implican $P(n) > 0$.

Además la serie debe ser convergente, caso contrario $P(0) < 0$ a partir de algún valor n_0 , para lo cual es necesario que se cumpla $|p| \leq 1$; pero como $p > 0$, resulta $0 < p < 1$ y la suma de la serie está dada por $1/(1-p)$

Se tiene entonces,

$$P(0) = 1 - \alpha p(1 + p + p^2 + p^3 + \dots) = 1 - \alpha p \left(\frac{1}{1-p} \right) \geq 0$$

de la desigualdad derecha se obtiene,

$$1 - \alpha p \left(\frac{1}{1-p} \right) \geq 0$$

$$1 - p \geq \alpha p$$

$$\frac{1-p}{p} \geq \alpha$$

por tanto queda establecida la desigualdad buscada,

$$1 + \alpha \leq \frac{1}{p}$$

Ahora bien, para $k \geq 1$, siendo iguales las pro-

habilidades de tener varones y nenas, ¿cuál es la probabilidad de que una familia dada tenga exactamente k hijos de sexo masculino?

Sea Y el número total de hijos que tiene una familia cualquiera, y sea X el número total de hijos varones.

La probabilidad de que una familia tenga exactamente k hijos varones se expresa,

$$P(X = k) = P\left[\bigcup_{n=k}^{\infty} \{X = k\} \cap \{Y = n\}\right]$$

$$P(X = k) = \sum_{n=k}^{\infty} P(X = k, Y = n)$$

$$P(X = k) = \sum_{n=k}^{\infty} P(X = k | Y = n) P(Y = n)$$

como la distribución de X condicional a $Y=n$ es una distribución binomial con parámetros $(1/2; n)$, y se tiene que:

$$P(X = k) = \sum_{n=k}^{\infty} C(n, k) \left(\frac{1}{2}\right)^n \alpha p^n$$

donde $C(n, k) = \binom{n}{k}$ es el número de formas que pueden resultar k varones en una familia con n hijos.

Se tienen entonces que,

$$P(X = k) = \alpha \sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{k!(n-k)!} \left(\frac{p}{2}\right)^n$$

Notar que para $0 < x < 1$,

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = (1-x)^{-1}.$$

Derivando sucesivamente hasta el k -ésimo orden se tiene,

$$\sum_{n=1}^{\infty} n x^{n-1} = (1-x)^{-2}$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) x^{n-2} = 2(1-x)^{-3}$$

$$\sum_{n=3}^{\infty} n(n-1)(n-2) x^{n-3} = 2 \cdot 3 (1-x)^{-4}$$

y así sucesivamente hasta la k -ésima derivada,

$$\sum_{n=k}^{\infty} n(n-1)\dots(n-k+n) x^{n-k} = k!(1-x)^{-(k+1)}$$

equivalentemente

$$\sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{(n-k)!} x^{n-k} = \frac{k!}{(1-x)^{(k+1)}}$$

haciendo $x=p/2$

$$\sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{(n-k)!} \left(\frac{p}{2}\right)^{n-k} = \frac{k!}{\left(1-\frac{p}{2}\right)^{(k+1)}}$$

$$\left(\frac{p}{2}\right)^{-k} \sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{(n-k)!} \left(\frac{p}{2}\right)^n = \frac{k!}{\left(\frac{2-p}{2}\right)^{(k+1)}}$$

$$\frac{2^k}{p^k} \sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{(n-k)!} \left(\frac{p}{2}\right)^n = \frac{2 \cdot 2^k k!}{(2-p)^{(k+1)}}$$

dividiendo por $2^k k!$ y multiplicando por αp^k

$$\alpha \sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{k!(n-k)!} \left(\frac{p}{2}\right)^n = \frac{2\alpha p^k}{(2-p)^{(k+1)}}$$

se obtiene entonces la expresión buscada para la probabilidad, esto es,

$$p(X=k) = \frac{2\alpha p^k}{(2-p)^{(k+1)}} \quad (17)$$

A continuación interesa saber cual es el número esperado de hijos del sexo masculino que tendría una familia; suponiendo que los hijos llevan el apellido del padre.

Se define X como el número de hijos varones. Se busca $E(X)$.

Por definición de valor esperado se tiene que $E(X) = \sum_{k=0}^{\infty} kP(X=k)$.

Ya se ha encontrado la expresión para la probabilidad de tener exactamente $k \geq 1$ hijos varones, es necesario determinar $P(X=0)$.

$$p(X=0) = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\alpha p^k}{(2-p)^{(k+1)}}$$

$$P(X=0) = 1 - \frac{2\alpha}{2-p} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{p}{2-p}\right)^k$$

como $p/(2-p) < 1 \Rightarrow p < 1$ resulta,

$$P(X=0) = 1 - \left(\frac{2\alpha}{2-p}\right) \frac{\frac{p}{2-p}}{1 - \frac{p}{2-p}}$$

entonces,

$$P(X=0) = 1 - \left(\frac{2\alpha}{2-p}\right) \frac{\frac{p}{2-p}}{\frac{2-p-p}{2-p}}$$

$$P(X=0) = 1 - \left(\frac{2\alpha}{2-p}\right) \frac{p}{2(1-p)}$$

$$P(X=0) = 1 - \left(\frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)}\right)$$

a continuación es posible determinar el valor esperado buscado,

$$E(X) = \sum_{k=0}^{\infty} kP(X=k)$$

$$E(X) = \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{2\alpha p^k}{(2-p)^{k+1}}$$

$$E(X) = \frac{2\alpha p}{(2-p)^2} \sum_{k=1}^{\infty} k \left(\frac{p}{2-p}\right)^{k-1}$$

usando el hecho que

$$\left(\sum_{k=0}^{\infty} x^k\right)' = \left(\frac{1}{1-x}\right)' \Rightarrow \left(\sum_{k=1}^{\infty} kx^{k-1}\right) = \frac{1}{(1-x)^2}$$

se obtiene,

$$E(X) = \frac{2\alpha p}{(2-p)^2} \frac{1}{\left(1-\frac{p}{2-p}\right)^2}$$

luego de simplificar términos queda,

$$E(X) = \frac{\alpha p}{2(1-p)^2}.$$

Se estudia a continuación las probabilidades de extinción de la población cuya evolución es descrita por la condiciones probabilísticas enunciadas al inicio de esta sección.

1. Caso $p < 1/2$

Como se ha visto previamente, si $E(X) \leq 1$ entonces la probabilidad de extinción es segura. Esto es, $\rho = 1$; por otra parte, si $E(X) > 1$ entonces la probabilidad de extinción $\rho \in (0, 1)$.

En efecto,

$$1 + \alpha \leq 1/p \Rightarrow \alpha \leq 1/p - 1 = \frac{1-p}{p}$$

entonces,

$$\frac{\alpha p}{2(1-p)^2} \leq \left(\frac{1-p}{p}\right) \frac{p}{2(1-p)^2}$$

$$\frac{\alpha p}{2(1-p)^2} \leq \frac{1}{2(1-p)} < \frac{1}{2} \cdot 2 = 1$$

pues $p < 1/2 \Rightarrow -p > -1/2 \Rightarrow 1-p > 1/2 \Rightarrow 2 > 1/(1-p)$.

En consecuencia, bajo estas condiciones, como la probabilidad de extinción es 1, el apellido es

seguro que se extinguirá.

2. Caso $p > 1/2$

Se sabe que si $E(X) > 1$ entonces $\rho \in (0, 1)$, donde ρ es la probabilidad de extinción; es al mismo tiempo, un punto fijo de la función generatriz.

La función generatriz de probabilidades se denota por G , esto es

$$\begin{aligned} G(s) &= E(s^X) \\ P(X=0) + \sum_{k=1}^{\infty} s^k P(X=k) \\ &= 1 - \frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} + \sum_{k=1}^{\infty} s^k \frac{2\alpha p^k}{(2-p)^{(k+1)}} \\ &= 1 - \frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} + \frac{\alpha p}{(2-p)} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{sp}{2-p} \right)^k \end{aligned}$$

donde la serie geométrica es convergente para $\frac{sp}{2-p} < 1$, por lo que se escribe,

$$\begin{aligned} G(s) &= 1 - \frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} + \left(\frac{2\alpha}{2-p} \right) \frac{\frac{sp}{2-p}}{1 - \frac{sp}{2-p}} \\ &= 1 - \frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} + \frac{2\alpha sp}{(2-p)(2-p-sp)} \end{aligned}$$

Recordar que se debe encontrar s tal que $s = G(s)$, se tiene que,

$$G(s) = 1 - \frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} + \frac{2\alpha sp}{(2-p)(2-p-sp)} \quad (18)$$

pero

$$c = 1 - \frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} \quad (19)$$

no depende de s , por lo que es considerado como una constante.

Por lo visto previamente, 1 es un punto fijo de la FGP; y además, ρ es el otro punto fijo de interés. En tal caso, se verifica que debe satisfacer, $(s-1)(s-\rho)=0$, esto es una ecuación de segundo grado en s .

$$s^2 - (1+\rho)s + \rho = 0 \quad (20)$$

De la ecuación (18) se obtiene,

$$s - c = \frac{2\alpha sp}{(2-p)(2-p-sp)}$$

$$(s-c)(2-p)(2-p-sp) = 2\alpha sp$$

A continuación, es necesario dividir la expresión obtenida por $(-p)$ de manera a conseguir una ecuación conveniente.

La ecuación resultantes es,

$$(s-c)(2-p) \left[s - \frac{2}{p} + 1 \right] = -2\alpha s \quad (21)$$

$$(s-c)(2-p) \left[\left(1 - \frac{2}{p} \right) + s \right] = -2\alpha s$$

$$(s-c) \left[(2-p) \left(1 - \frac{2}{p} \right) + (2-p)s \right] = -2\alpha s$$

$$\begin{aligned} &\left[(2-p) \left(1 - \frac{2}{p} \right) s + (2-p)s^2 \right] - \\ &\left[c(2-p) \left(1 - \frac{2}{p} \right) + c(2-p)s \right] = -2\alpha s. \end{aligned}$$

Reordenando convenientemente,

$$(2-p)s^2 + \left[(2-p) \left(1 - \frac{2}{p} \right) - c(2-p) \right] s - c(2-p) \left(1 - \frac{2}{p} \right) = -2\alpha s.$$

Para comparar ésta ecuación con la ecuación (20) es necesario dividirla por $(2-p)$ obteniéndose,

$$s^2 + \left[\left(1 - \frac{2}{p} \right) - c \right] s - c \left(1 - \frac{2}{p} \right) = -\frac{2\alpha s}{2-p} \quad (22)$$

Usando la ecuación 22 y la expresión para c de la expresión 20 se obtiene,

$$\rho = \left[\frac{\alpha p}{(2-p)(1-p)} - 1 \right] \left(1 - \frac{2}{p} \right) = \frac{[\alpha p - (2-p)(1-p)]}{(2-p)(1-p)} \left(1 - \frac{2}{p} \right).$$

Luego de simplificar $(2-p)$, finalmente se obtiene la expresión para el otro punto fijo de la función generatriz de probabilidades, esto es,

$$\rho = \frac{[(2-p)(1-p) - \alpha p]}{p(1-p)} \quad (23)$$

Este resultado y tomando en consideración las consecuencias del teorema (3.2) proporciona la probabilidad de que un apellido se extinga en ésta población.

CONCLUSIÓN

La teoría de los procesos de ramificación se apoya firmemente en el concepto de función generatriz de probabilidades. Estas funciones tienen la ventaja de facilitar el cálculo de los valores esperados, así como la determinación de las probabilidades de que la variable aleatoria asociada tome un valor específico. Otra cualidad de estas funciones es que permiten mayor facilidad en la determinación de las correspondientes funciones de probabilidad; además de proporcionar herramientas que reducen el esfuerzo de operar con sumas de variables aleatorias y permiten el cálculo de cualquiera de las probabilidades a partir de la función generatriz.

Los cálculos recurren en general a tres procedimientos estándar; (1) Hacer uso del hecho que la función de probabilidad suma 1 para buscar una expresión adecuada. (2) Utilizar el teorema de partición para hallar el valor esperado. (3) Usar la suma de una sucesión de variables aleatorias independientes más simples.

El proceso básico de ramificación, considerado en este trabajo, es un ejemplo de procesos en espacio y tiempo discreto. La discretización del tiempo es justificada al unir el paso del tiempo con la aparición de sucesivas generaciones de la población. Notar que muchas especies tienen tiempos de apareamiento regulares y en consecuencia se produce una nueva generación en momentos regulares aproximadamente discretos en el tiempo. En cada etapa, cada individuo tiene cierta probabilidad de contribuir con un número de descendientes, k , a la siguiente generación. Por tanto, la no existencia de descendientes puede interpretarse como que el individuo fallece antes del inicio de la nueva generación; $k = 1$ indica que el individuo sobrevive a la aparición de la nueva generación pero no tuvo descendientes; en general $k > 1$ implica que el individuo sobrevive y tiene varios descendientes que viven en la siguiente generación. Un individuo que sobrevive a la siguiente generación aún puede tener descendencia en la generación que vive.

En los procesos de ramificación es crucial determinar la distribución del tamaño total de

la población luego de transcurrir un número fijo de generaciones; aunque es posible determinar la evolución y la probabilidad de extinción de la población sin tener conocimiento explícito de tal distribución, bastando solo el conocimiento de los valores medios y la varianza del número total de individuos en una generación dada y determinando el valor del punto fijo de la función generatriz de probabilidades que corresponde a la variable aleatoria estudiada.

El proceso de ramificación es un caso especial de las cadenas de Markov pues el modelo supone que los individuos en cualquier generación tienen descendientes independientemente de lo que ocurrió en la pasada generación.

El problema de la población americana es ciertamente un modelo sencillo en el que las probabilidades de descendencia son iguales para cada individuo en cada generación. Una suposición adicional es que los tiempos entre generaciones es fijo y que todos los individuos de una generación dada se reproducen de manera independiente. Esto es, se está considerando una población homogénea, donde cada miembro tiene la misma probabilidad de fertilidad y sobrevivencia; ésta suposición es desde luego discutible en una población real pues es posible que existan numerosos factores que generen una población no homogénea.

Tal como se ha resuelto el ejemplo de la población americana, se evidencia que no ha sido necesario determinar cuál es la forma específica de la distribución del tamaño de la población, simplemente ha bastado con encontrar los puntos fijos de la función generatriz de probabilidad para conocer la probabilidad de extinción de la misma.

Notar que una vez conocidos los valores numéricos de la media y la varianza del número de descendientes que cada individuo de la población en una generación dada, si la media es mayor que uno, tanto la media como la varianza del tamaño poblacional tienden al infinito cuando crece el número de generaciones; además la probabilidad de extinción está entre 0 y 1. Si por otra parte, el promedio de descendientes por individuo es menor que 1, la probabilidad de extinción es 1, esto es, la

población ciertamente desaparecerá.

REFERENCIAS

- BARDINA, X. (2008). Processos de ramificació (mimeo). Barcelona: Universidad Autónoma de Barcelona.
- BENNEWITZ J., MEUWISSEN T. H. E. (2005). Estimation of Extinction Probabilities of Five German Cattle Breeds by Population Viability Analysis; J. Dairy Sci. 88, 2949 - 2961 American Dairy Science Association.
- ESQUIVEL M. (2004). Probability Generating Functions for Discrete Real Valued Random Variables. Internet: <http://ferrari.dmat.fct.unl.pt/personal/mle/PUBLrdf/GPGF-04VII19.pdf>
- FELLER W. (1968). An introduction to Probability theory and its Applications. 3rd ed. John Wiley and Sons.
- HACCOU P., JAGERS J., VATUTIN V. (2005). Branching Processes: Variation, Growth and Evolution of Populations, Cambridge: Cambridge University Press.
- HARRIS, T.E. (1963). The theory of branching processes. Berlin: Springer-Verlag.
- HEYDE C. C., SENETA E. (1977). I.J. Bienayme: Statistical Theory Anticipated. New York: Springer Verlag . pp. 117.
- HOFFMAN-JØRGENSEN J. (1994). Probability with a view towards statistics. Volume I, Chapman and Hall.
- JAGERS P. (2009). Some Notes on the History of Branching Processes, from my Perspective. Oberwolfach. Internet: www.math.chalmers.se/jagers/Branching20History.pdf
- KENDALL D. G. (1966). Branching Processes
- Since 1873, Journal of London Mathematics Society, vol. 41, p. 386.
- LANDO S. K. (2003). Lectures on generating Functions, Student Math. Library American Mathematical Society.
- NAKAMURA M., PEREZ-ABREU V. (1993a). Use of an empirical probability generating function for testing a Poisson model. Canadian. J. Stat. 21, No.22 149-156.
- NAKAMURA M., PEREZ-ABREU V. (1993b). Empirical probability generating function. An overview. Insur. Math. Econ. 123 349-366.
- RAUP, D. M. (1991). Extinction. New York: Norton.
- ROYCHOUDHURY S., BHATTACHARJEE, M.C. (2006), A Family of Probability Generating Functions Induced by Shock Models. New Jersey Institute of Technology, CAMS Report 0506-40, Center for Applied Mathematics and Statistics.
- RUEDA R., O'REILLY F. (1999). Tests of fit for discrete distributions based on the probability generating function. Commun. Stat., Simulation Comput. 28 1 (1999) 259-274.
- THEODOROU K., COUVERT D. (2006). On the expected relationship between inbreeding, fitness and extinction. vol. 38. INRA, EDP sciences.
- VILLA E. R., ESCOBAR L.A. (2006); Using Moment Generating Functions to Derive Mixture Distributions. The American Statistician, Vol. 60, No. 1.
- Wikipedia: <http://en.wikipedia.org/wiki/Galton-Watson-process>, Fecha acceso: Agosto, 2009.

**ESTUDIO TEÓRICO DE LAS PROPIEDADES MOLECULARES DEL ANTIBIÓTICO
CINOXACINA AL NIVEL DE TEORÍA B3LYP/6-311++G(d,p)****THEORETICAL STUDY OF THE MOLECULAR PROPERTIES OF CINOXACIN
ANTIBIOTIC AT THE B3LYP/6-311++G(d,p) LEVEL OF THEORY**DAVID A. BERNIS URBIETA^(1,2), NORMA B. CABALLERO⁽³⁾, MARÍA P. BADENES^(4,5), CARLOS J. COBOS⁽⁴⁾¹Docente, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Asunción, Campus Universitario, San Lorenzo, Paraguay²Jefe de División Medicamentos Veterinarios. Dirección General de Laboratorios (DIGELAB). Servicio Nacional de Calidad y Salud Animal (SENACSA). San Lorenzo, Paraguay.³Docente y Coordinadora de Postgrado e Investigación en Química, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Asunción, Campus Universitario, San Lorenzo, Paraguay⁴Investigador del CONICET, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata UNLP, Casilla de Correo 16, Sucursal 4, (1900) La Plata, Argentina.⁵Docente, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata UNLP.

Email: davidber_10@hotmail.com; norbc37@gmail.com; mbadenes@inifta.unlp.edu.ar; cobos@inifta.unlp.edu.ar

Resumen: La cinoxacina es un antibiótico totalmente sintético de la familia de las quinolonas. Estas sustancias son un grupo de agentes antibacterianos de amplio espectro que tuvieron origen a partir del descubrimiento fortuito del ácido nalidixico en 1962. Con dicho descubrimiento, comenzó una gran cantidad de investigaciones en torno a este tipo de antibióticos sintéticos. La modificación estructural de los mismos, permitía mejorar sus propiedades y ampliar así el arsenal de medicamentos antibacterianos conocidos. Como resultado de dichas investigaciones y en la búsqueda del antibiótico perfecto en 1971 fue diseñada la cinoxacina. Actualmente se emplean los métodos computacionales en conjunción con los experimentales para realizar investigaciones sobre estos compuestos. Este artículo está basado en un trabajo de tesis donde se realizó la comparación entre diferentes métodos disponibles en el programa GAUSSIAN 03 a fin de establecer cuál de todos los métodos empleados resulta más apropiado para el estudio de este tipo de sustancias. En ese marco, se presenta aquí la caracterización de la molécula de cinoxacina empleando el funcional híbrido B3LYP con el conjunto de bases 6-311++G(d,p).

Palabras clave: Cinoxacina; antibiótico; quinolona; métodos computacionales; DFT.

Abstract: Cinoxacin is a fully synthetic antibiotic of the quinolone's family. These substances are a group of broad-spectrum antibacterial agents originated from the fortuitous discovery of nalidixic acid in 1962. Since then, a great quantity of investigations on these synthetic antibiotics has started. Structural modification of these species allowed to improve their properties and, in this way, to extend the arsenal of known antibacterial drugs. In 1971, cinoxacin was designed as a result of the above investigations and in the search of the perfect antibiotic. Nowadays, computational together with experimental methods are employed to performed investigations about this family of compounds. This article is based on a thesis in which a comparison between the different methods available in the GAUSSIAN 03 program package was performed in order to establish which method result more suitable to study this type of molecules. In this context, the characterization of the cinoxacin molecule using the B3LYP hybrid functional with the 6-311++G(d,p) basis set is presented here.

Keywords: Cinoxacin; antibiotic; quinolone; computational methods; DFT.

INTRODUCCIÓN

Es innegable el gran aporte que ha dado al área de la salud la cinoxalina, un antibiótico de la familia de las quinolonas, de allí la importancia de

aumentar los conocimientos de sus propiedades moleculares.

La necesidad de conocer en profundidad estos compuestos, su conformación y sus propiedades

Primera generación	Segunda generación	Tercera generación	Cuarta generación
Ácido nalidíxico	Ciprofloxacina	Levofloxacina	Balofloxacina
Ácido oxolínico	Enoxacina	Esparfloxacina	Clinafloxacina
Ácido pipemídico	Fleroxacina	Tosufloxacina	Trovafloxacina
Ácido piromídico	Lomefloxacina	Gatifloxacina	Gemifloxacina
Cinoxacina	Norfloxacina	Grepafloxacina	Moxifloxacina
Flumequina	Ofloxacina		Pazufloxacina
	Pefloxacina		Sitafloxacina

Tabla I. Clasificación de las quinolonas por generaciones.

motivó el desarrollo del presente trabajo. Para ello, hemos estudiado esta quinolona relacionando valores moleculares teóricos con los experimentales disponibles en la bibliografía.

La familia de las quinolonas se clasifica en generaciones, que varían ligeramente de acuerdo a los autores. En 1997 se propuso una nueva clasificación de las quinolonas que más adelante se fue ampliando con la aparición de nuevos compuestos. La Tabla I muestra esta división que tiene que ver con las características estructurales, con la época de su desarrollo y con su espectro de actividad. (Campos Sepúlveda et al. 2010; Jiménez Pacheco 2011).

Descripción molecular de la cinoxacina

Es una de las primeras quinolonas junto al ácido nalidíxico. Se trata de una molécula tricíclica derivada de la 4-quinolona, que fue sintetizada y utilizada en Estados Unidos de Norteamérica. La

cinoxacina presenta una estructura molecular que tiene un átomo de nitrógeno en la posición 2 en lugar de un átomo de carbono, lo cual le confiere mejores propiedades farmacocinéticas (Bolton et al. 2008). Su nombre (IUPAC) sistemático es ácido 1-etil-4-oxo-[1,3]dioxolo[4,5-g]cinolina-3-carboxílico. En la Tabla II se resumen algunas de sus propiedades.

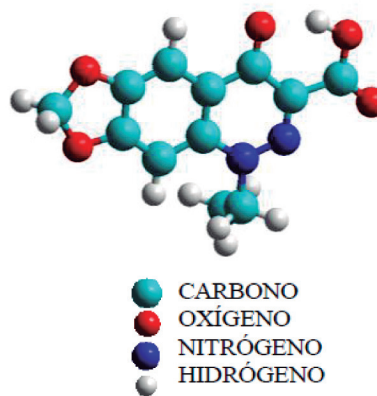
Mecanismo de acción de las quinolonas

Las quinolonas son agentes antibacterianos con actividad ante microorganismos Grampositivos y Gramnegativos. Se describe un mecanismo de acción prácticamente único en las quinolonas. Ellas actúan inhibiendo ciertas enzimas, es decir, bloquean la duplicación bacteriana del ADN al inhibir la topoisomerasa bacteriana II (ADN Girasa) y la topoisomerasa IV, indispensables en la síntesis del ADN. (Glówka et al. 2003)

La enzima topoisomerasa II o girasa del ADN

Peso Molecular	262.2182 [g/mol]
Formula Molecular	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₅
Grupos dadores de enlace-H	1
Grupos aceptores de enlace-H	7
Cantidad de enlaces rotativos	2
Masa exacta	262.058971
Superficie topológica polar	88.4
Cantidad de átomos pesados	19
Carga Formal	0

Tabla II. Propiedades de la cinoxacina.



es responsable del enrollamiento del ADN, manteniendo los cromosomas en un estado de superrespiral y fijándolos a la superficie interna de la célula, además se encarga de pequeñas roturas de filamentos de ADN que ocurren durante el proceso de multiplicación de este. (Moisés Morejón García & Rosa Salup Díaz s.f.; Eduardo Rodríguez Noriega et al. s.f.)

La topoisomerasa IV se encarga de separar la parte replicada del ADN. (Brugueras et al. 2005).

Estructura de las quinolonas

Las quinolonas están formadas por una estructura básica denominada núcleo quinolónico, que es el ácido nalidíxico, la primera quinolona sintetizada. A partir de ella se han desarrollado por lo menos cuatro grandes grupos de compuestos según el número y posición de átomos de nitrógeno de la molécula. Estos grupos son: Las benzopiridonas, las naftiridinas, las cinolinas, y las piridopirimidinas.

La cinoxacina pertenece al grupo de compuestos derivados de la cinolina (Figura 1).

Relación estructura – actividad

Existen numerosos estudios que demuestran la relación que existe entre la estructura química y la actividad biológica de estos antibióticos. (Tillotson 1996; Emami et al. 2009; Chu & Fernandes 1989; Renau et al. 1996). En ellos se acepta que la estructura básica de la quinolona (unidad central molecular que transporta los rasgos esenciales responsables para la actividad biológica) requerida para la actividad antibacteriana se compone de la 4-piridona que es un anillo con un grupo 3-car-

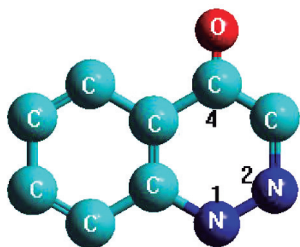


Figura 1. Una de las estructuras básicas de las quinolonas, 2-aza-4-quinolona ó cinolina.

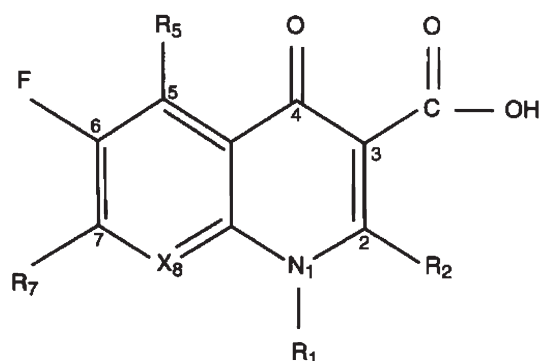


Figura 2. Estructura base de la quinolona

boxílico, también denominado 4-quinolín-3-carboxílico (Figura 2).

En el anillo, las posiciones 1, 5, 6, 7 y 8 son los objetivos principales de variación de estos productos químicos con el fin de obtener diferentes propiedades en los mismos.

Química Computacional

La química computacional, es una rama de la química teórica moderna. Se la puede considerar formada por dos grandes áreas, dedicadas a las estructuras de las moléculas y a su reactividad, basadas en principios físicos diferentes: mecánica molecular (MM) ó de campo de fuerza, y métodos de estructura electrónica (MEE). (Foresman et al. 1996)

Los métodos de mecánica molecular se caracterizan por su particular campo de fuerza, debido a esto también se los denomina de esa manera.

Entre los tipos de métodos de estructura electrónica (MEE) o mecano-cuánticos tenemos: los métodos semiempíricos, los *ab initio* y la teoría del funcional de la densidad (DFT). Los métodos DFT son interesantes porque incluyen los efectos de correlación electrónica sin elevar demasiado el costo computacional.

Métodos de Estructura electrónica (MEE)

Los métodos mecano-cuánticos para la resolución de la estructura electrónica se basan en los principios de la mecánica cuántica. La ecuación de Schrödinger en estado estacionario es el punto

Enlaces	Experimental	B3LYP/6-311++G(d,p)
C(6)-C(8)	1,397	1,406
O(5)-C(8)	1,357	1,359
C(8)-C(9)	1,371	1,369
C(5)-C(6)	1,341	1,363
O(4)-C(6)	1,358	1,368
O(5)-C(7)	1,429	1,441
C(9)-C(10)	1,417	1,420
C(4)-C(5)	1,422	1,418
C(4)-C(10)	1,414	1,413
N(1)-C(10)	1,391	1,388
O(4)-C(7)	1,422	1,430
C(3)-C(4)	1,434	1,453
N(1)-N(2)	1,313	1,320
N(1)-C(11)	1,463	1,478
C(2)-C(3)	1,451	1,459
O(3)-C(3)	1,248	1,246
N(2)-C(2)	1,318	1,309
C(11)-C(12)	1,510	1,528
C(1)-C(2)	1,503	1,522
O(1)-C(1)	1,316	1,337
O(2)-C(1)	1,211	1,202
Desviación Media	0,010	

Tabla III. Comparación entre las longitudes de enlace (en Å) de cinoxacina obtenidas por métodos teóricos con los valores experimentales disponibles. (Rosales et al. 1985)

partida para resolver este problema. Esta es una ecuación de autovalores que toma la forma:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

En la cual, $\hat{H}$ es el operador de Hamilton (suma de los operadores energía cinética y energía potencial), Ψ es la función de onda y E es el autovalor o energía total del sistema.

Esta ecuación sólo puede resolverse de forma exacta para el átomo de hidrógeno o para moléculas simples como H_2^+ . Para átomos plurieléctricos y moléculas desde la más sencilla hasta las más complejas, se hace necesario recurrir a distintas aproximaciones (método variacional y teoría

de perturbaciones) para su resolución.

El tipo de método conocido como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) es uno de los métodos más utilizados en los cálculos cuánticos de la estructura electrónica de la materia. Su atractivo reside en que se incluyen efectos de correlación electrónica, es decir, se considera la interacción repulsiva entre los electrones de un sistema molecular sin aumentar excesivamente el costo computacional. Por tal motivo, para este trabajo se ha decidido escoger un método de DFT. En particular, se empleó el funcional híbrido B3LYP, basado en el funcional de intercambio de tres parámetros de Becke unido al funcional de correlación de Lee,

Ángulos	Experimental	B3LYP/6-311++G(d,p)
C(5)-C(6)-C(8)	110,4	109,6
C(6)-C(8)-C(9)	123,6	123,0
O(5)-C(8)-C(9)	126,0	127,4
C(5)-C(6)-C(8)	121,9	121,6
O(4)-C(6)-C(8)	108,6	109,2
O(4)-C(6)-C(5)	129,4	129,2
C(7)-O(5)-C(8)	106,0	106,1
C(8)-C(9)-C(10)	115,3	116,5
C(4)-C(5)-C(6)	117,7	117,3
C(4)-C(10)-C(9)	121,6	120,6
N(1)-C(10)-C(9)	119,9	121,2
N(1)-C(10)-C(4)	118,6	118,3
C(6)-O(4)-C(7)	107,2	106,2
O(4)-C(7)-O(5)	107,8	107,2
C(5)-C(4)-C(10)	119,9	121,0
C(3)-C(4)-C(10)	119,5	119,5
N(2)-N(1)-C(10)	123,4	123,4
O(3)-C(3)-C(4)	122,9	122,5
N(2)-C(2)-C(3)	124,0	123,1
C(1)-C(2)-C(3)	120,9	122,2
Desviación media	0,75	

Tabla IV. Comparación entre los ángulos de enlace (en grados) de cinoxacina con los valores experimentales disponibles. (Rosales et al. 1985)

Yang y Parr. (Foresman et al. 1996)

El método del funcional de la densidad no intenta calcular la función de onda molecular, sino que calcula la densidad de probabilidad electrónica molecular, ρ_0 , y estima la energía electrónica molecular a partir de ρ_0 . (Levine 2001)

La principal ventaja de trabajar con la densidad electrónica reside en que la misma depende únicamente de tres coordenadas espaciales, mientras que la función de onda electrónica de una molécula de n electrones depende de $3n$ coordenadas espaciales y n coordenadas de espín.

Es decir, mientras la complejidad de una función de onda aumenta al aumentar el número de electrones, la densidad electrónica tiene siempre

el mismo número de variables (independientemente del tamaño del sistema).

MATERIALES Y MÉTODOS

Se comenzó por la recopilación de datos experimentales disponibles de la quinolona en estudio. En particular, se buscaron los datos de los parámetros moleculares de interés, es decir, de los ángulos y longitudes de enlace, así como información espectroscópica.

Luego se trabajó con los programas computacionales y un clúster de computadoras bajo plataforma Linux, utilizado para realizar la totalidad de los cálculos teóricos.

Los niveles de teoría se describen en la si-

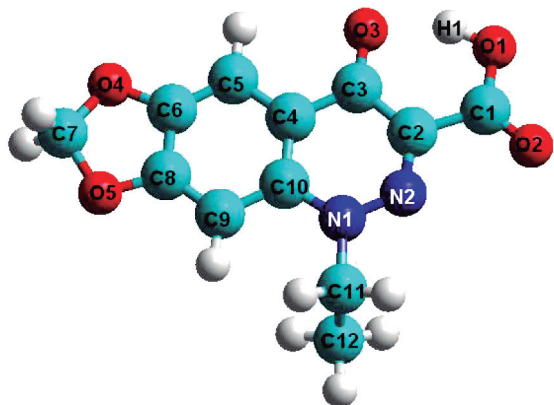


Figura 3. Geometría optimizada del antibiótico cinoxacina al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p).

guiente forma:

	Método Teórico / Conjunto de bases
Ejemplo:	↓ ↓
	B3LYP / 6-311++G(d,p)

Como se mencionó, el funcional B3LYP es un funcional híbrido que emplea el funcional de intercambio de tres parámetros de Becke y el funcional de correlación de Lee, Yang y Parr. El mismo se utilizó acoplado al conjunto de bases 6-311++G(d,p).

Se procedió al estudio de la cinoxacina al nivel de teoría mencionado, corroborando los resultados obtenidos con datos experimentales disponibles. También se realizó la asignación de algunas de las frecuencias vibracionales calculadas por visualización de la animación de los modos normales.

Todos los cálculos mencionados se realizaron en un clúster instalado en el Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) que posee doce computadoras Pentium D 945 de 3,4 GHz y doce Pentium Quad Core de 3,2 GHz bajo plataforma Linux (IA S.A., modelo IAP4-08/08). Se emplearon para ello los programas GAUSSIAN 03 e HYPERCHEM 7.01. Por otra parte, a través de la biblioteca electrónica de la Secretaría de Ciencia y Técnica de la UNLP se tuvo acceso la literatura necesaria para afrontar el trabajo.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación se presentan los resultados obtenidos junto con algunas discusiones y observaciones.

Los resultados obtenidos se presentan en las tablas siguientes, en las cuales se han incluido los datos experimentales para poder hacer comparaciones. Estos datos experimentales fueron tomados de la literatura disponible. (Rosales et al. 1985)

En la Tabla III se observan las longitudes de enlace, y en la Tabla IV los ángulos de enlace.

Los valores encontrados resultan muy satisfactorios ya que las desviaciones medias absolutas encontradas son pequeñas en los dos casos. En la Figura 3 se muestra la geometría molecular obtenida al nivel de teoría mencionado.

En el caso de las distancias de enlace se encontró una desviación media de 0,010 Å, mientras que para los ángulos de enlace la misma fue de 0,75 grados. Una manera de visualizar más fácilmente la excelente correlación obtenida se muestra en las Figuras 4 y 5, en las cuales se representan los resultados calculados versus los experimentales, con coeficientes r^2 de 0,98 y 0,99 para los ángulos y las distancias de enlace, respectivamente.

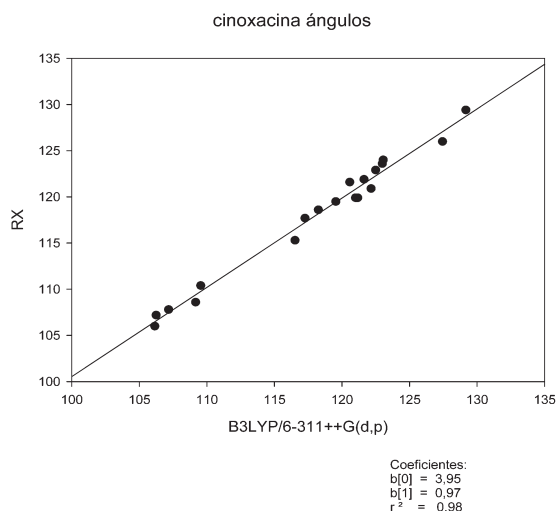


Figura 4. Gráfico que muestra la correlación existente entre los valores de los ángulos de enlace obtenidos computacionalmente al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p) con los valores experimentales de RX. (Rosales et al. 1985)

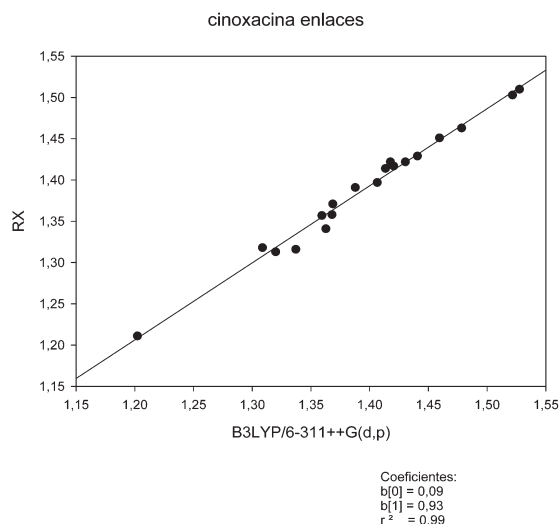


Figura 5. Gráfico que muestra la correlación entre las longitudes de enlace obtenidas computacionalmente al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p) y las experimentales de RX. (Rosales et al. 1985)

En la Tabla V se presentan algunas de las frecuencias vibracionales estimadas al nivel de teoría

preestablecido con sus respectivas asignaciones, comparándolas con los valores experimentales disponibles en la literatura especializada. Las asignaciones mencionadas se realizaron por observación de la animación de los modos normales importando las frecuencias calculadas con el programa GAUSSIAN 03 al programa HYPER-CHEM 7.01.

CONCLUSIONES

Se realizó un estudio de la cinoxacina observando detalladamente las propiedades moleculares de la misma.

Se logró a través de este trabajo, la caracterización del antibiótico cinoxacina, presentado valores de ángulos y longitudes de enlace, así como frecuencias vibracionales armónicas, todos obtenidos al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p).

Se analizaron los resultados obtenidos al comparar los datos experimentales de la cinoxacina con los obtenidos computacionalmente demos-

Frecuencia cm ⁻¹	IR int. Km.mol ⁻¹	Asignación Aproximada
3258	686	Est. C(9)-H
3035	107	Est. sim. C(7)-H ₂
1823	434	Est. C(1)=O(2)
1645	127	Def. en el plano del anillo arom.
1626	458	Est. C(3)=O(3)
1509	123	Tij. C(11)-H ₂ , C(12)-H ₂ ; Flex. en el plano O(1)-H
1504	285	Tij. C(12)-H ₂
1493	153	Tij. C(11)-H ₂ ; Flex. C(12)-H ₃
1479	584	Flex. en el plano O(1)-H
1300	202	Est. N(1)-C(11); Est. C-C del anillo arom.
1284	95	Tors. C(11)-H ₂ ; Est. N(1)-N(2)
1253	177	Flex. en el plano C(5)-H; C(9)-H
1056	134	Est. sim. O(4)-C(7)-O(5)
954	61	Est. asim. O(4)-C(7)-O(5)
853	77	Flex. fuera del plano O(1)-H

Tabla V. Asignación de algunas frecuencias vibracionales armónicas (en cm⁻¹) de cinoxacina por métodos teóricos al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p). **Obs.:** 1 Debye² Angstrom⁻²-amu⁻¹ (IR intensity unit) = 42,2561 km mol⁻¹. **Abreviaturas empleadas en la tabla:** *Est.*: estiramiento; *Est. sim.*: estiramiento simétrico; *Est. asim.*: estiramiento asimétrico; *Flex.*: flexión; *Tors.*: torsión; *Tij.*: tijereteo; *Def.*: deformación; *Arom.*: aromático.

trando una muy buena correlación. Por lo tanto, se concluye que el método teórico escogido resulta adecuado para el estudio de este tipo de sustancias y una vez más queda demostrada la potencialidad de las herramientas computacionales para este tipo de estudios.

AGRADECIMIENTOS

A la Red de Macrouniversidades de América Latina y el Caribe por la asignación de una beca de Movilidad de Postgrado que me permitió realizar gran parte del presente trabajo en Argentina. Al Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), por abrir sus puertas para realizar este trabajo en sus instalaciones. A la Universidad Nacional de Asunción (UNA). Al Estimado Decano de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FaCEN), Constantino Nicolás Guéfos, MAE, y a los miembros del Consejo Directivo de la Facultad por su apoyo para la realización de este proyecto. Al Servicio Nacional de Calidad y Salud Animal (SENACSA).

BIBLIOGRAFÍA

- Bolton, E.E. et al., 2008. Chapter 12 PubChem: Integrated Platform of Small Molecules and Biological Activities. En Elsevier, págs. 217-241. Available at: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574140008000121> [Accedido Agosto 17, 2011].
- Bruguera, M.C., García, M.M. & Díaz, R.S., 2005. Actualidad de las quinolonas. *Revista Cubana de Farmacia*, 39(1), pág.1.
- Campos Sepúlveda, A.E., Martínez Enríquez, M.E. & Mendoza Patiño, N., 2010. Quinolonas. *Revista de la Facultad de Medicina*, 51(004).
- Chu, D.T. & Fernandes, P.B., 1989. Structure-activity relationships of the fluoroquinolones. *Antimicrobial agents and chemotherapy*, 33(2), pág.131.
- Emami, S., Shafiee, A. & Foroumadi, A., 2009. Quinolones: recent structural and clinical developments. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research*, 4(3), pág.123-136.
- Foresman, J.B., Frisch, Æ. & Gaussian, Inc. Pittsburgh, 1996. *Exploring chemistry with electronic structure methods* Segunda edición.
- Glówka, M.L. et al., 2003. Intramolecular hydrogen bond between 4-oxo and 3-carboxylic groups in quinolones and their analogs. Crystal structures of 7-methyl- and 6-fluoro-1,4-dihydro-4-oxocinnoline-3-carboxylic acids. *Journal of Molecular Structure*, 658(1-2), pág.43-50.
- Jiménez Pacheco, A., 2011. Determinación de resistencias a quinolonas en aislados clínicos de *Escherichia coli* productores de betalactamasas de espectro extendido.
- Levine, I.N., 2001. *Química cuántica*, Pearson Educación.
- Moisés Morejón García & Rosa Salup Díaz. 2003;1(3):170-178. Morejón y col. Actualización en quinolonas. *Rev Electron Biomed / Electron J Biomed* 2003;1(3):170-178.
- Renau, T. et al., 1996. Structure-activity relationships of quinolone agents against mycobacteria: effect of structural modifications at the 8 position. *Antimicrob. Agents Chemother.*, 40(10), pág.2363-2368.
- Rodríguez Noriega, E. et al. Programa de actualización continua parainfectología. terapia antiinfecciosa. Programa de actualización continua en infectología. Available at: <http://www.drscope.com/pac/infecto-1/c3/index.htm> [Accedido Septiembre 27, 2011].
- Rosales, M.J. et al., 1985. Structure of the antimicrobial agent cinoxacin. *Acta Crystallographica Section C Crystal Structure Communications*, 41(12), pág.1825-1826.
- Tillotson, G.S., 1996. Quinolones: structure-activity relationships and future predictions. *Journal of Medical Microbiology*, 44(5), pág.320-324.

**ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL RADICAL ClSO_2 AL NIVEL DE TEORÍA
B3LYP/6-311+G(d)****COMPUTATIONAL STUDY OF THE ClSO_2 RADICAL AT THE B3LYP/6-311+G(d) LEVEL
OF THEORY**ROSSANA BENÍTEZ^(1,2), NORMA B. CABALLERO^(1,3), MARÍA P. BADENES^(4,5), CARLOS J. COBOS⁽⁴⁾¹Docente, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNA.²Docente Técnico, Laboratorio Instrumental, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNA.³Coordinadora de Maestría, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNA.⁴Investigador del CONICET, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata UNLP, Casilla de Correo 16, Sucursal 4, (1900) La Plata, Argentina.⁵Docente, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata UNLP.

Email: rossben21@gmail.com, norbc37@gmail.com, mbadenes@inifta.unlp.edu.ar, cobos@inifta.unlp.edu.ar

Resumen: Hoy en día, toda la comunidad científica sabe que la información que suministran los métodos de la química cuántica resulta de suma importancia. Los métodos teóricos se vuelven de gran utilidad especialmente cuando las técnicas experimentales disponibles resultan muy costosas o complicadas e incluso, en algunos casos, riesgosas. En este trabajo se realizaron cálculos teóricos de las propiedades moleculares y termoquímicas del radical ClSO_2 . Este radical es de interés en la química atmosférica ya que podría formarse por recombinación de átomos de Cl y SO_2 , conocidos contaminantes atmosféricos. En particular, se determinó su geometría molecular, se calcularon sus frecuencias vibracionales armónicas y también se estimó su entalpía de formación estándar al nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d). El cálculo de esta última propiedad se realizó mediante dos métodos diferentes. Por un lado, se la determinó a partir del cálculo de la energía de atomización total y, por otro, a partir de reacciones isodésmicas. El método teórico mencionado, se encuentra accesible en el programa GAUSSIAN 09. Los cálculos fueron realizados en el Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), en la ciudad de La Plata, Argentina.

Palabras Clave: ClSO_2 , geometría molecular, frecuencias vibracionales, entalpías de formación.

Abstract: Nowadays, the entire scientific community knows information supply by methods of quantum chemistry is of great importance. Theoretical methods have become of great usefulness especially when experimental available techniques are very expensive or complicated and even, in some instances, dangerous. In this work, theoretical calculations of molecular and thermochemical properties of the ClSO_2 radical have been performed. This radical is interesting of a point of view of atmospheric chemistry since it could be formed by recombination of Cl atoms and SO_2 , well-known atmospheric pollutant. In particular, molecular geometry was determined, harmonic vibrational frequencies were calculated and also standard enthalpy of formation was estimated at the B3LYP/6-311+G(d) level of theory. Calculation of last property has been performed using two different approaches. On a hand, it was determined by calculation of its total energy and, on the other hand, by isodesmic reactions. Mentioned theoretical method is available in GAUSSIAN 09 program package. Calculations were performed at Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) of the National University of La Plata (UNLP), in the city of La Plata, Argentina.

Key words: ClSO_2 , molecular geometry, vibrational frequencies, enthalpies of formation.

INTRODUCCIÓN

El óxido de azufre que se emite a la atmósfera en mayores cantidades es el dióxido de azufre, SO_2 , y en menor proporción, el anhídrido sulfúrico, SO_3 . El SO_2 es un gas incoloro, bastante es-

table e irritante en concentraciones superiores a 3 ppm y si bien es 2,2 veces más pesado que el aire, se desplaza rápidamente en la atmósfera. La combustión de cualquier sustancia que contenga azufre produce emisiones tanto de SO_2 como de SO_3 . Las

emisiones del primero de estos gases, provienen principalmente de la combustión de petróleo y carbón destinado a producir energía eléctrica, pero también está presente de manera natural en regiones con actividad volcánica. El SO_3 está siempre presente en una muy baja proporción en las emisiones de SO_2 . Por otra parte, otra especie que presenta azufre, H_2S , ingresa a la atmósfera tanto desde volcanes activos como por descomposición de la materia orgánica en pantanos o ciénagas. El H_2S es un gas incoloro y altamente venenoso que por oxidación genera SO_2 . En conjunto, más de la mitad del dióxido de azufre que llega a la atmósfera desde todas las fuentes es emitido por actividades humanas. Las fuentes, emisiones y destino de todos estos gases se explica dentro del ciclo del azufre. Aún actualmente hay diversas incertidumbres relativas a las fuentes, reacciones, y también destinos de estas especies de azufre atmosférico. En algunos estudios del ciclo natural del azufre se centró la atención en el análisis del mecanismo por el cual el SO_2 forma presumiblemente ácido sulfúrico a través de procesos de oxidación e hidratación, pero este mecanismo no explica la eliminación del azufre atmosférico de manera eficiente. Por tales motivos, es de esperar que el SO_2 reaccione con otras especies presentes en la atmósfera. Esta hipótesis se ve apoyada también por el hecho de que el tiempo de vida del SO_2 en la atmósfera va desde días a semanas y porque su concentración puede exceder la de especies radicales reactivas tales como NO , NO_2 y OH , que están involucradas en la descomposición de los CFC (clorofluorocarburos) y HFC (hidrofluorocarburos). Por otro lado, se reconoce en la actualidad que la introducción de grandes cantidades de CFC o de compuestos alternativos en la atmósfera origina una variedad de especies que contienen halógenos. Por lo tanto, es posible que algunas de estas especies halogenadas puedan reaccionar con el SO_2 atmosférico. Hoy en día la química computacional puede ayudarnos a estudiar tanto estructuras moleculares como reacciones químicas fundamentándose en las leyes de la física. Algunos métodos o modelos computacionales pueden usarse no sólo para conformar

moléculas estables, sino también para predecir estados de transición o intermediarios de reacción cuyo tiempo de vida es muy corto imposibilitando hasta la fecha que sean observados experimentalmente. Además de permitir predecir estructuras y propiedades de moléculas, también nos permite calcular energías absolutas y relativas, dipolos eléctricos, distribuciones de cargas, frecuencias vibracionales armónicas y anarmónicas, reactividad y hasta secciones eficaces para la colisión con otras partículas. De esta forma, la química computacional nos resulta una herramienta analítica muy valiosa cuyos resultados podrían complementar la información obtenida en estudios químicos experimentales y en algunos casos predecir procesos ó resultados fisicoquímicos no observados experimentalmente aún.

En particular, se empleó en este trabajo un método accesible en el programa GAUSSIAN 09. (Gaussian 09, 2009)

La química computacional está compuesta por dos grandes áreas, dedicadas a las estructuras de las moléculas y a su reactividad, basadas en principios físicos diferentes. (Foresman, 1996). Una de estas áreas es la denominada mecánica molecular (MM) basada en la mecánica clásica. Y por otro lado, están los métodos de estructura electrónica (MEE), basados en la aplicación de la mecánica cuántica a los sistemas atómicos y moleculares. En los métodos de la MM no se utiliza un operador Hamiltoniano o función de onda molecular y no se resuelve la ecuación de Schrödinger. Éstos no tratan expresamente a los electrones, sino que sus efectos están incluidos en los campos de fuerza a través de la parametrización, de esta forma estos métodos posibilitan estudiar sistemas con miles de átomos con un bajo costo computacional. En cambio, los MEE, emplean la mecánica cuántica, para analizar el tratamiento de núcleos y electrones, que son considerados como partículas puntuales con carga y masas fijas e invariables, que interaccionan según la ley de Coulomb. Dentro los MEE, se encuentran tres grupos:

- los métodos *ab initio*
- los métodos del funcional de la densidad

(DFT, por sus siglas en inglés)

- y los métodos semiempíricos.

De estos tres grupos, los métodos semiempíricos son los de más bajo costo computacional dando buena descripción cualitativa de los sistemas moleculares. También pueden dar resultados cuantitativos aceptables para sistemas que están parametrizados. Los DFT incluyen efectos de la correlación electrónica, son comparables a los métodos *ab initio* en algunos aspectos y dan resultados algunas veces comparables a éstos con un costo computacional menor. Y por último, los métodos *ab initio* dan predicciones de alta calidad y cuantitativas, pero con un costo computacional mucho mayor a los dos anteriores.

Los cálculos realizados se llevaron a cabo empleando el método del funcional de la densidad. La principal ventaja de éstos radica en que trabajando con la densidad electrónica se depende únicamente de tres coordenadas del espacio, mientras que la función de onda electrónica de una molécula de n electrones es dependiente de $3n$ coordenadas espaciales y n coordenadas de espín. Dentro de estos métodos existen los métodos **Puros**, que pueden definirse como una combinación de un funcional de intercambio con uno de correlación. Dando como ejemplo el funcional BLYP, que combina el funcional de intercambio de Becke, con el funcional de correlación de Lee, Yang y Parr (LYP) (Becke, 1988) (Lee, 1988). Además de los métodos puros también se encuentran los métodos **Híbridos** en los que el funcional de intercambio es una combinación lineal del intercambio de Hartree-Fock, un funcional de intercambio de DFT y uno de correlación de DFT. Dentro de estos últimos tenemos por ejemplo al funcional híbrido B3LYP, que utilizamos en este trabajo, el cual incluye al funcional de intercambio de tres parámetros de Becke, B3, combinado con el funcional de correlación de LYP.

Por otro lado, todo método se emplea acoplado a un conjunto de base adecuado. Éstos están relacionados con los orbitales moleculares y pueden definirse como combinaciones lineales de un grupo de funciones pre-definidas de un electrón, de-

nominadas funciones de base. Éstos también pueden estar compuestos por combinaciones lineales de funciones gaussianas, denominadas primitivas. Cuanto mayor es el conjunto de bases menos limitados están los electrones y la aproximación de los orbitales moleculares resulta más exacta. Específicamente en este trabajo, los cálculos fueron realizados con la base 6-311+G(d).

METODOLOGÍA

En particular, para estimar las entalpías de formación se emplearon energías de atomización totales y esquemas de reacciones isodésmicas. Estos métodos constituyen una poderosa herramienta en el caso de especies para las que no se disponen de datos experimentales o los mismos no resultan confiables.

Para realizar las estimaciones se utilizaron las energías totales, entalpías y energías de punto cero calculadas con el programa GAUSSIAN 09 empleando la teoría del funcional de la densidad. Los cálculos fueron realizados en el Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), en la ciudad de La Plata, Argentina.

Energías de atomización totales: Uno de los métodos que se utilizó para estimar la entalpía de formación del ClSO_2 involucra el cálculo de la energía de atomización total de tal especie a 0 K. Esta propiedad se define como la diferencia de energía a 0 K entre una molécula y los átomos que la constituyen. La energía de atomización total de una molécula M la denotaremos $\Sigma D_0(M)$. Posteriormente, se estima la entalpía de formación a 0 K de la especie M , $\Delta_f H^0(M, 0 \text{ K})$, como la diferencia entre las entalpías de formación de los átomos mencionados y la energía de atomización calculada, $\Sigma D_0(M)$. Finalmente, para convertir la entalpía de formación obtenida a 298 K se aplican correcciones térmicas. La reacción tomada en cuenta para llevar a cabo el cálculo de la entalpía de formación a partir de la energía de atomización en el presente trabajo fue



Parámetro	ClSO ₂
r(S=O)	1,462
r(S-O)	1,462
r(S-Cl)	2,206
∠ (O-S-Cl)	108,3

Tabla 1: Parámetros geométricos calculados para el radical ClSO₂ al nivel B3LYP/6-311+G(d) (longitudes de enlace en Angstroms, ángulos en grados).

Reacciones isodésmicas e isogíricas: Una reacción isodésmica es una reacción real ó hipotética, que se caracteriza por tener el mismo número y tipo de enlaces tanto en los reactantes como en los productos formados. Es decir los enlaces que se forman en los productos son del mismo tipo que los que se rompen en los reaccionantes para dar dicho producto, aunque se considera que hay cambios entre sus relaciones mutuas (Foresman, 1996). Por otra parte, las reacciones isogíricas son reacciones en las cuales tanto productos como reactivos conservan el mismo número de pares de electrones. Debido a esto se puede decir que la entalpía de una reacción isodésmica e isogírica es una medida de las desviaciones respecto de la aditividad de las energías de enlace. Las entalpías de reacción de este tipo de reacciones se pueden predecir con bastante precisión mediante el uso de métodos teóricos debido a la cancelación de los errores ocasionados por el truncamiento de las bases a ambos lados de la reacción. Debido a esta propiedad, tales reacciones se convirtieron en una herramienta simple y efectiva para estimar cuantitativamente la entalpía de formación de alguna de las especies que participa en ellas. Las reacciones tomadas en cuenta para llevar a cabo el cálculo de las entalpías de formación a partir de reacciones isodésmicas en el presente trabajo fueron:

1. $\text{SCl}_2 + \text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{OH} \rightarrow 2\text{ClSO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$
2. $\text{SCl}_2 + \text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{CH}_3\text{O} \rightarrow 2\text{ClSO}_2 + 2\text{CH}_3\text{OH}$
3. $\text{SCl}_2 + \text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{FO} \rightarrow 2\text{ClSO}_2 + 2\text{FOH}$
4. $\text{SCl}_2 + \text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{CH}_3\text{OO} \rightarrow 2\text{ClSO}_2 + 2\text{CH}_3\text{OOH}$

RESULTADOS

Geometría molecular y frecuencias vibracionales armónicas: La geometría molecular completamente optimizada y las frecuencias vibracionales armónicas se calcularon al nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d). La asignación de frecuencias se derivó a partir de la animación de los modos normales correspondientes a las frecuencias fundamentales mediante el programa HYPERCHEM 5.1.

En la Tabla 1 se listan los parámetros geométricos derivados para el radical bajo estudio mientras que en la Figura 1 se presenta un esquema que muestra la distribución espacial de los átomos en el mismo.

Por otra parte, en la Tabla 2 se observan las frecuencias vibracionales armónicas calculadas al nivel de teoría mencionado junto con las correspondientes intensidades y asignaciones aproximadas.

Entalpía de formación determinada a partir de la energía de atomización total: De acuerdo a lo indicado en la sección Metodología, se estimó para el radical ClSO₂ una energía de atomización total, $\Sigma D_0 = 222,1 \text{ kcal mol}^{-1}$, lo cual conduce a una entalpía de formación a 0 K de $-9,8 \text{ kcal}$

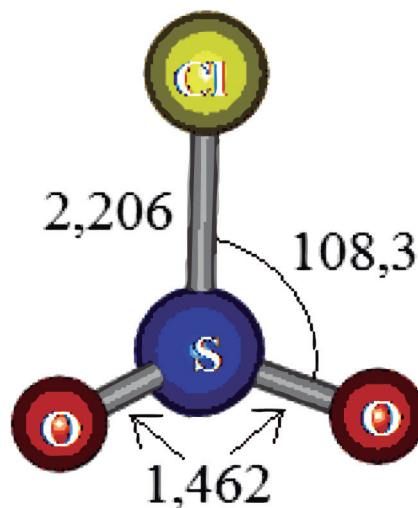


Figura 1: Estructura molecular del radical ClSO₂ obtenida al nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d).

ClSO ₂		
Frecuencia	Intensidad	Asignación Aproximada
223,4	7,4	Balanceo en el plano (Cl-S-O)
233,7	2,7	Aleteo fuera del plano (Cl-S-O)
406,2	60,5	Estiramiento (Cl-S)
477,2	66,6	Tijereteo en el plano (O-S-O)
1062,3	84,7	Estiramiento simétrico (SO ₂)
1246,4	128,6	Estiramiento asimétrico (SO ₂)

Tabla 2: Frecuencias vibracionales (en cm⁻¹) e intensidades IR (en km mol⁻¹) junto con asignaciones aproximadas para ClSO₂, calculadas al nivel B3LYP/6-311+G(d).

mol⁻¹. De esta manera, aplicando posteriormente correcciones térmicas, se derivó el valor de -10,6 kcal mol⁻¹ para la entalpía de formación estándar de ClSO₂.

Entalpía de formación determinada a partir de reacciones isodésmicas: En la Tabla 3 se listan las entalpías de formación a 298 K derivadas para el radical ClSO₂ a partir de cada una de las reacciones isodésmicas mencionadas previamente. El valor promedio derivado a partir de ellas resultó de -51,9±3,2 kcal mol⁻¹. Se evidencia una gran diferencia respecto de la entalpía de formación determinada mediante la energía de atomización total. Esto pone de manifiesto la importancia de usar altos niveles de teoría cuando se emplean reacciones de atomización, ya que las mismas no son isodésmicas e isogíricas. Por el contrario, cuando se emplean estas últimas, los errores asociados al truncamiento de las bases y a la energía de correlación prácticamente se cancelan. Por este motivo, se propone como entalpía de formación estándar del radical ClSO₂ el valor de -51,9±3,2 kcal mol⁻¹, derivado por este último método.

Nivel de teoría	ClSO ₂			
	1	2	3	4
B3LYP/6-311+G(d)	-52,3	-51,1	-50,1	-54,0

Tabla 3: Entalpías de formación a 298 K calculadas para el radical ClSO₂ a partir de reacciones isodésmicas (en kcal mol⁻¹). (Las reacciones tomadas en cuenta son las descriptas en la sección Metodología).

CONCLUSIONES

Las determinaciones de las propiedades termodinámicas moleculares de un sistema resultan de gran utilidad en la predicción y/o la comparación con datos experimentales, tales como caminos de reacción termodinámicamente factibles así como las constantes de equilibrio. En el caso de este trabajo, no se dispone de información experimental para su comparación. Los datos aportados aquí se espera que no sólo sirvan para caracterizar el radical estudiado sino también para orientar futuros trabajos experimentales. En particular, se han determinado su estructura molecular y sus frecuencias vibracionales armónicas al nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d). Además, se estimó su entalpía de formación estándar mediante dos métodos diferentes. Al derivarlas a partir de la energía de atomización total se obtuvo el valor de -10,6 kcal mol⁻¹, mientras que un promedio de las entalpías de formación calculadas mediante reacciones isodésmicas conduce al valor de:

$$\Delta H_{f,298} \text{ ClSO}_2 = -51,9 \pm 3,2 \text{ kcal mol}^{-1}$$

De esta forma se evidencia la importancia de utilizar métodos computacionales de muy alto nivel si se quieren obtener resultados satisfactorios cuando se emplean energías de atomización. Debido a que en las reacciones isodésmicas e isogíricas el número y tipo de enlaces a ambos lados de la reacción es el mismo, los errores asociados a los cálculos mecanocuánticos prácticamente se

cancelan. Por tal motivo, es de esperar que los resultados obtenidos a partir del empleo de este tipo de reacciones sean más confiables.

AGRADECIMIENTOS

A la Red de Macrouniversidades de América Latina y el Caribe; Programa de Movilidad de Posgrado.

BIBLIOGRAFÍA

- BECKE, A. B. 1988. "Funcional de la densidad de intercambio de energía con la aproximación asintótica correcta, el comportamiento." *Phys. Rev. A*, 38 - 3098.
- FORESMAN, J.B. 1996. "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", Second Edition, Gaussian Inc.
- GAUSSIAN 09, Revisión A.1. 2009. Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, N. J.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- LEE, C., Yang, W., PARR, R.G. 1998. "Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density." *Physical Review B* 37. 785-789.

ANFIBIOS DE LA BAHÍA DE ASUNCIÓN (DISTRITO DE LA CAPITAL, PARAGUAY)**AMPHIBIANS FROM ASUNCIÓN BAY (CAPITAL DISTRICT, PARAGUAY)**ANDREA CABALLERO GINI¹, KATIA AIRALDI WOOD², MARCELA FERREIRA RIVEROS³ & LIA ROMERO NARDELLI³¹Estudiante de Maestría en Biodiversidad y Sistemática. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad Nacional de Asunción. ancgini@gmail.com.²Asociación Paraguaya de Herpetología. Asunción-Paraguay. kairaldi@gmail.com.³Estudiantes de la Carrera de Biología. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad Nacional de Asunción. mavef30@gmail.com, lrrn87@gmail.com.

Resumen: Los anfibios atraviesan serios problemas de conservación en todo el mundo, y en Paraguay pocos fueron los esfuerzos por conocer su diversidad. El Departamento Central y Asunción contienen casi el 45% de las especies de anfibios registradas para el país. La Bahía de Asunción constituye un antiguo meandro del Río Paraguay, y contiene diversos hábitats que varían anualmente. El área ha sido declarada como área de importancia para la conservación de las aves (IBA), y a nivel nacional como Reserva Ecológica en el año 2005. El objetivo principal de este estudio fue conocer la composición de anfibios anuros de la Bahía de Asunción, por medio de métodos de inventario, proporcionando bases para futuros trabajos de conservación de la biodiversidad. Los resultados fueron el registro de 20 especies de anfibios anuros, de las cuales 19 son nuevos para la Bahía de Asunción.

Palabras clave: *Anfibios, Conservación, Bahía de Asunción, Paraguay.*

Abstract: Amphibians are going through serious conservation problems worldwide, and in our country few were the efforts to get to know their diversity. The Central Department and Asunción (Paraguay), have almost 45% of registered species of amphibians for the country. The area has been declared important for bird conservation (IBA), and nationally as Ecological Reserve in 2005. Asunción Bay (Bahía de Asunción) is an old meander of the Paraguay river, and contains diverse habitats that vary annually. The main objective of this study was to determine the composition of amphibians at Asunción Bay, through inventory methods, providing basis for future conservation studies of biodiversity. The results of the present study were the recording of 19 species of amphibians, which 19 of them are new records for the Bahía de Asunción.

Keywords: *Amphibians, Conservation, Bahía de Asunción, Paraguay.*

INTRODUCCIÓN

La Bahía de Asunción está ubicada a orillas del Río Paraguay, en el límite entre la Región Oriental y la Región Occidental. Tiene una superficie aproximada de 375 ha. y alberga una variedad de hábitats, que incluyen embalsados, lagunas, bancos de arena, cuya disponibilidad cambia a lo largo del año. Esto, junto con su ubicación en una zona donde convergen las unidades biogeográficas de Chaco y Paraguay Central (Dinerstein et al., 1995), influye positivamente en el alto índice de biodiversidad presente (Birdlife, 2012). A pesar de ello la diversidad de anfibios en la zona es prácticamente desconocida, habiendo un solo registro para la

zona perteneciente a *Pseudis limellum* (Brusquetti & Lavilla, 2006).

La Bahía de Asunción se encuentra separada de la capital por el Río Paraguay, formando una península de tierras bajas, en la cual se asientan áreas urbanizadas y puertos comerciales, y turísticos de gran importancia económica para la capital.

Este sitio, de gran importancia biológica y cultural, fue nombrado Reserva Biológica del Banco San Miguel y Bahía de Asunción en el año 2005 por tratarse de uno de los pocos espacios verdes de la capital, pero no cuenta con un plan de manejo y se enfrenta a problemas de contaminación y pérdida de hábitats.

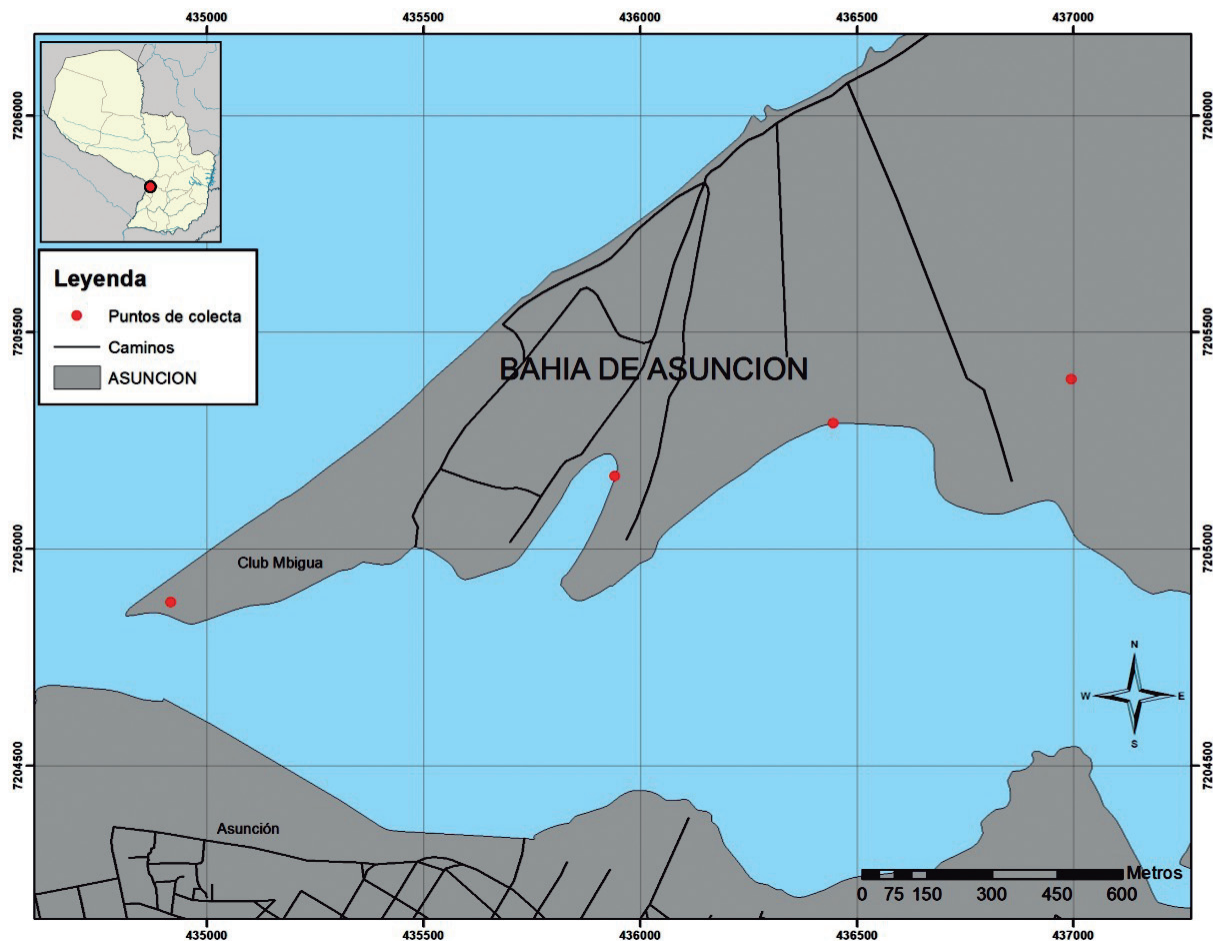


Figura 1. Mapa de la Bahía de Asunción.

Caben mencionar algunos reportes sobre efectos de la contaminación realizados en la Bahía de Asunción como, estudios realizados por la CORPOSANA (actual ESSAP, Empresa de Servicios Sanitarios del Paraguay) sobre descargas de alcantarillados, y aumentos de los niveles de metales pesados en sedimentos de la Bahía registrados por Facetti & Van Espen en el año 1979.

En cuanto a los anfibios, los datos de poblaciones de anuros en zonas urbanas son escasos, y esto dificulta la realización de estudios que evalúen el impacto de la acción antrópica en dichas poblaciones, imposibilitando la cuantificación de especies que declinan por pérdida de hábitats, contaminación y cambios en el uso del suelo. Por dicho motivo el objetivo principal de este trabajo fue conocer

la riqueza de anfibios anuros de la Bahía de Asunción y además realizar una categorización de su estado de conservación.

MATERIALES Y MÉTODOS

Área de Estudio: La Bahía de Asunción, está ubicada a orillas del Río Paraguay 25° 15' S 57° 37' O (ver Figura 1), pertenece a la eco-región Chaco Húmedo (Dinerstein et al, 1995), y cuenta con una combinación de ecosistemas cuya disponibilidad varía a lo largo del año.

Se encuentran entre las zonas muestreadas embalsados, charcos temporales, lagunas, bancos de arena, zonas de vegetación arbustiva densa y zonas de asentamientos urbanos con instalaciones industriales (Figura 2).

Trabajo de Campo: Para inventariar las especies de anfibios de la Bahía de Asunción, se realizaron 13 salidas de campo durante los meses de setiembre 2010 y setiembre del 2011, en las zonas más representativas del área. Fue tramitado el correspondiente permiso de colecta científica expedido por la SEAM (Secretaría del Ambiente).

Se utilizaron los métodos de inventarios propuestos por (Heyer et al. 1994), realizando relevamientos por encuentros visuales y técnicas de transectas auditivas; además fue analizado material bibliográfico. Los ejemplares capturados fueron identificados siguiendo a Ceí, 1980; Frost, 2011; Lavilla, 2005 y Straneck et al., 1993. Los datos correspondientes a los individuos colectados fueron registrados en planillas previamente elaboradas, y luego los ejemplares fueron fijados en Formol al 10% y preservados en Alcohol al 70%, para ser depositados en la Colección Zoológica de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Asunción, Paraguay (CZCEN). Los datos colectados fueron cargados en tablas para ser analizados y graficados. Se rea-

lizó una curva de acumulación de las especies registradas utilizando EstimateSWin820

Para categorizar las especies de anfibios registradas se siguió a la Unión Internacional para la Conservación de la Naturaleza (UICN 2009) a nivel regional, la categorización de la Herpetofauna paraguaya de Motte et al. (2009) y el trabajo de Brusquetti & Lavilla (2006).

Para caracterizar los hábitats donde fueron registradas las especies se siguió a Heyer et al. (1994) y publicaciones locales sobre flora del Chaco Húmedo, bosques ribereños, y descripciones sobre la vegetación y comunidades de la Bahía de Asunción como el informe del Relatorio de Impacto Ambiental del Programa de Desarrollo de la Franja Costera de Asunción y Birdlife (2012).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Hasta este trabajo la única especie registrada para la zona de la Bahía de Asunción era *Pseudis limellum* (Brusquetti & Lavilla, 2006). En el transcurso de nuestro inventario registramos 19 especies más, pertenecientes a 5 familias y 12 géneros,



Figura 2: Zonas muestreadas del área de estudio. A: embalsados, B: charcos temporales, C: lagunas, D: zonas de vegetación herbácea, E: bancos de arena, F: zonas urbanas e industrializadas.

	ESTADO DE CONSERVACION	
	UICN 2009	Motte et al. 2009
BUFONIDAE		
<i>Rhinella bergi</i>	LC	LC
<i>Rhinella schneideri</i>	LC	LC
CYCLORAMPHIDAE		
<i>Odontophrynus americanus</i>	LC	LC
HYLIDAE		
<i>Dendropsophus nanus</i>	LC	LC
<i>Hypsiboas punctatus</i>	LC	LC
<i>Hypsiboas raniceps</i>	LC	LC
<i>Phyllomedusa azurea</i>	DD	LC
<i>Pseudis limellum</i>	LC	LC
<i>Pseudis platensis</i>	LC	LC
<i>Scinax acuminatus</i>	LC	LC
<i>Scinax fuscovarius</i>	LC	LC
<i>Scinax nasicus</i>	LC	LC
<i>Trachycephalus typhonius</i>	LC	LC
LEIUPERIDAE		
<i>Physalaemus albonotatus</i>	LC	LC
<i>Physalaemus cuvieri</i>	LC	LC
<i>Pseudopaludicola falcipes</i>	LC	LC
LEPTODACTYLIDAE		
<i>Leptodactylus latrans</i>	LC	LC
<i>Leptodactylus chaquensis</i>	LC	LC
<i>Leptodactylus podicipinus</i>	LC	LC
MICROHYLIDAE		
<i>Elachistocleis bicolor</i>	LC	LC

Tabla I. Categorización de anfibios en la Bahía de Asunción. LC (Preocupación menor). DD (Datos insuficientes).

cuya nomenclatura y categorización (siguiendo a UICN, 2012, a nivel regional y a Motte et al., 2009, a nivel nacional), se presentan en la Tabla I. La mayor parte de las especies se encuentra en la categoría de preocupación menor, con sólo una, *Phyllomedusa azurea*, considerada con datos insuficientes según la UICN y en preocupación menor en la categorización de Motte et al. (2009).

Las especies arbóricolas de anfibios fueron localizadas en su mayoría en ambientes peridomici-

lios, que aún conservan vegetación arbustiva y herbácea. Fueron registrados anfibios arbóricolas y acuáticos entre la vegetación flotante y arraigada a la costa, algunas especies vegetales que se encuentran de manera abundante, son *Eichornia crassipes*, *Pistia stratiotes*, *Sagittaria montevidensis* y *Polygonum* sp. Se han encontrado además individuos asociados a especies de la familia Asteraceae y otras como: *Crataeva tapia*, *Comelina diffusa*, *Cyperus giganteus*. Las especies

terrestres de anfibios por su parte fueron detectadas en gran número en sustratos provenientes de desechos de origen antrópico que llegan a las playas de la Bahía (llantas, isopor, plásticos), los que son utilizados como refugios. En el gráfico 1 se observa la relación de individuos registrados con respecto a los microhábitats utilizados.

Leptodactylus latrans, *L. chaquensis*, *L. podicipinus* y *Rhinella schneideri*, todas observadas en las trece salidas, parecen ser las especies que presentan mayor tolerancia a las alteraciones presentes en el sitio, mientras que *Trachycephalus typhonius* o ju'i pakova fue registrada en el área de estudio solo por colecta de larvas; la especie no fue escuchada vocalizando, ni sus adultos avistados durante el periodo de estudio.

El estudio realizado en la Bahía de Asunción contempla la presencia del 47% de las especies de anfibios citadas en el Departamento Central y Asunción, lo que constituye el 20% de la totalidad de especies de anfibios del Paraguay (Airaldi et al., 2009; Brusquetti & Lavilla, 2006; Brusquetti

et al, 2007; Brusquetti & Lavilla, 2008; Céspedes & Motte, 2007). Es más que probable que se agreguen nuevas especies a la lista presentada en este trabajo con la continuidad de relevamientos, dado que la curva de acumulación (ver gráfico 2 de especies por esfuerzo de muestreo no está estabilizada.

En la Bahía de Asunción las principales amenazas son la pérdida y degradación de hábitats por la constante urbanización y contaminación, pero con los resultados del presente estudio, se demuestra que a pesar del mal estado en el que se encuentra el área, sobreviven distintas especies de anfibios, y aunque para algunas poblaciones de anfibios la pérdida de hábitats por la formación de asentamientos humanos constituye su desaparición del área, para otras especies es una oportunidad para la colonización de estos sitios disponibles (Acosta et al, 2005). Con estos antecedentes se torna necesaria y urgente la realización de estudios de flora y fauna del área, con el fin de contemplar un plan de manejo adecuado para la Reserva, y así preservar

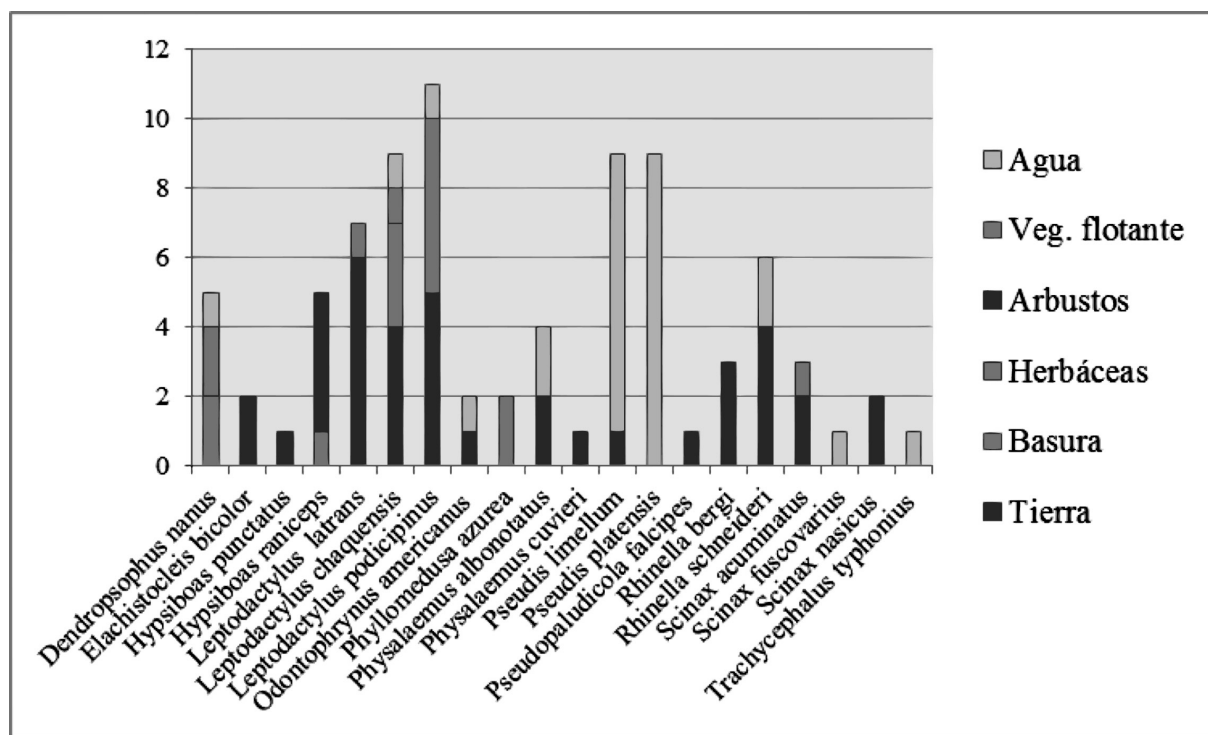


Gráfico 1. Microhábitats utilizados por los individuos registrados.



Gráfico 2. Curva de acumulación de especies, donde se observa que los valores que corresponden a las nuevas especies aun no son constantes y la curva sigue creciendo.

la riqueza biológica de la Bahía de Asunción.

AGRADECIMIENTOS

A la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, y al Centro de Estudiantes de FaCEN por el apoyo. Alejandro Bonzi, Gabriela Hüttemann, Alberto Carosini, Monserrat Pedrozo, Julio Torres, Frederick Bauer, Marcelo Dujak y Ruth Ferrando por su GRAN ayuda en las colectas. Hugo Cabral por la elaboración del mapa. A Andrea Weiler, Sergio Ríos y Esteban Lavilla por las revisiones. Al Club Nacional de Regatas el Mbigua, por el permiso concedido.

BIBLIOGRAFÍA

- AIRALDI, K., D. BALDO, E. O. LAVILLA. 2009. Amphibia, Anura, Bufonidae, *Melanophryniscus devincenzii*: First record for Paraguay and geographic distribution map. Check List 5(3): 377–379, 2009.
- ACOSTA, R., V. MESONES & A. NÚÑEZ. 2005. Fauna de anuros en la Ciudad de Salta, Argentina. Rev. biol. trop v.53 n.3-4.
- BIRDLIFE INTERNATIONAL. 2012. Important Bird Areas factsheet: Bahía de Asunción.
- BRUSQUETTI, F. & E. LAVILLA. 2006. Lista Comentada de los Anfibios de Paraguay. Cuad. Herpetol., 20 (2): 3-79.
- BRUSQUETTI, F.; D. BALDO & M. MOTTE. 2007. Amphibia, Anura, Bufonidae, *Melanophryniscus krauczuki*: Geographic distribution map and first record for Paraguay. Check List, 3 (2): 141-142.
- BRUSQUETTI, F. & E. LAVILLA. 2008. Amphibia, Anura, Hylidae, *Hypsiboas curupi*: First record for Paraguay. Check List 4(2): 145, 2008.
- CEI, J. M. 1980. Amphibians of Argentina. Monitore Zoologico Italiano. Italian journal of Zoology.
- CÉSPEDÉZ, J. A. & M. MOTTE. 2007. Una nueva especie de *Melanophryniscus* Gallardo, 1961 de Paraguay (Amphibia: Anura: Bufonidae). FACENA 23: 31-42.
- DINERSTEIN, E., D. M. OLSON, D. J. GRAHAM et al. 1995. Una evaluación del estado de conservación de las ecorregiones terrestres de América Latina y el Caribe.

Downloaded from <http://www.birdlife.org> on 10/01/2012

- WMF-Banco Mundial.
- FACETTI, J. F. Evolución de los Niveles de Metales Tóxicos y Alcalinos en Sedimentos de Fondo de la Bahía de Asunción desde 1991 a 2000.
- FROST, D. R. 2011. Amphibian Species of the World: an Online Reference. Version 5.5 (31 January, 2011). Electronic Database accessible at [http://research.amnh.org/vz/herpetology/amphibia/American Museum of Natural History](http://research.amnh.org/vz/herpetology/amphibia/American_Museum_of_Natural_History), New York, USA.
- HAYES, F. & J. FOX. 1991. Seasonality, habitat use and flock sizes of shorebirds at the Bahía de Asunción, Paraguay. *Wilson Bull.*, 103(4): 637-649.
- HEYER, R. , A. DONELLY, R. McDIARMID et al. 2001. Métodos estandarizados para anfibios. Editorial Universitaria de la Patagonia.
- KIRCHNER, C. 1979. Efectos de la descarga de alcantarillado de la Ciudad de Asunción, sobre la calidad de agua en el Río Paraguay. Informe técnico CORPOSANA.
- LAVILLA, E. O. 2005. Anfibios de la Reserva el Bagual. *Temas de Nat. y Cons.* 4: 119-153. Di Giacomo, A. G y S. F. Krapovickas, Eds. (2005)
- LESTERHUIS, A.J., & R.P. CLAY. 2001. Nearctic shorebirds in Bahía de Asunción, Paraguay. *Wader Study Group Bulletin* 95:19.
- MOTTE, M., K. NUÑEZ, P. CACCIALI et al. 2009. Categorización del Estado de Conservación de los Anfibios y Reptiles de Paraguay. *Cuad. herpetol.*, 23 (1): 5-18.
- RELATORIO DE IMPACTO AMBIENTAL: Programa de Desarrollo de la Franja Costera de Asunción. 2004. Equipo de Abt Associates Inc.
- STRANECK, R., E. DE OLMEDO & G. CARRIZO. 1993. Catálogo de voces de anfibios argentinos. Ediciones L.O.L.A.
- UICN. 2010. The UICN Species Survival Commission 2009 The IUCN Red List of Threatened Species. <www.iucnredlist.org>. Acceso: Mayo 2010.

DISTINCIÓN SISMOLÓGICA ENTRE EL MANTO ARQUEOZOICO Y EL PROTEROZOICO: LA RAÍZ DE LA LITOSFERA BAJO LA CUENCA DEL PARANÁ, AMÉRICA DEL SUR

SEISMOLOGICAL DISTINCTION BETWEEN ARCHEAN AND PROTEROZOIC MANTLE: THE LITHOSPHERIC ROOT BENEATH PARANÁ BASIN, SOUTH AMERICA

JAIME LEONARDO BAÉZ PRESSER¹

¹*Diamond Geology Consultant, Asuncion, Paraguay. Correo electrónico: jaimleonardobp@gmail.com*

Resumen: La Cuenca del Paraná, es una amplia cuenca sedimentaria situada en la porción centro-este de América del Sur que frecuentemente se considera se desarrolló durante parte de las eras Paleozoica y Mesozoica. Siendo que esta cuenca está constituida por rocas sedimentares e ígneas. A la Cuenca del Paraná corrientemente se la considera como una típica cuenca flexural de interior cratónico. Buscando saber si la Cuenca del Paraná yace sobre un manto Arqueozoico o Proterozoico se levantaron, con base a perfiles 1D-Vs (Presser, 2010a y d) y su derivado perfil de perturbación de la velocidad media $(V_{sv} + V_{sh})/2$ con respecto al modelo global 1D AK135, inferencias puntuales de interface litosfera-astenosfera o límite litosfera-astenosfera (LAB) en 210 puntos (repartidos de 2 en 2 grados y en algunos de 1 en 1 grado). Al contar con un número espaciado de puntos donde se definieron los LAB superiores a >193,5-195 Km (=profundidad LAB que denotaría edades >2500 Ma., estimado a partir de $z=0.04 \cdot t + 93.6$ de Artemieva, 2006), se bosqueja un arreglo cratónico (=Archon). Configuración refinada se obtuvo al combinar los datos de LAB obtenidos junto con la tomografía sísmica Vs y Ps (publicados e inéditos), selectos datos de flujo de calor superficial (publicados), la actividad sísmica registrada regional; en combinación a las informaciones gravimétricas y magnetométricas (en escala continental). Trazado que delimite un gigante dominio cratónico de forma irregular y algo alargada en dirección NNE-SSW que se extiende entre Paraguay-Brasil-Argentina-Uruguay. Influencia tectónica Archon al que se entendió como siendo el Cratón Río de la Plata y al que se le sub dividió en 3, inferidas, potestades Archons: 1-Río de la Plata, 2- Paramatá y, 3- Paranapanema. Al Archon Río de la Plata se le asignaron sub aéreas o dominios: Río Apa (LAB: ~195-223Km o = ~3100-2501Ma.), Río Paraná (LAB: ~195-201 o Km = ~2900-2501 Ma.) y Río Uruguay (LAB: ~196-213 o Km = ~2700-2510 Ma.). El Dominio Río Apa englobaría, parcialmente, las exposiciones del Alto de Río Apa donde trabajos publicados mostraron edades U-Pb del Proterozoico Inferior y que muestran edad TDM del Arqueozoico y dos registros en zircones con edades U-Pb de entre 3000 a 3028 Ma. =Terreno Archon en sus bordes encajados/soldados por fajas Proton/Tecton. El Dominio Río Apa muestra en profundidad una bien definida, en términos de Vs y Ps, blue-zone (150 a >250 Km) como sistemáticamente reconocido por debajo de los grandes cratones Arqueozoicos de ambiente peridotítico frío y depletado. Estudios sobre los diamantes de Capiibary/Paraguay-Oriental, (en/junto al Archon Río de la Plata, Dominio Río Apa), permitieron derivar un tiempo de residencia de 3.1 Ga. (3100 Ma.) en su matriz; un aposento de manto peridotítico (hazburgítico o lherzolitico) depletado (Smith et al., 2012). Los datos comentados para el Archon Río de la Plata, en su Dominio Río Apa junto al Paraguay, se harían extensivos y válidos para los Dominios Río Paraná y Río Uruguay, considerando el conjunto de informaciones geofísicas de aplicación y consideración en común. Así, del mismo modo se haría extensiva para los Archones Paramatá (LAB: ~195-222Km o = ~3050-2501 Ma.) y Paranapanema (LAB: ~195-240Km o = ~3500-2501 Ma.); siendo que ambos se desconocen exposiciones del basamento por estar cubiertos por sedimentos de la Cuenca del Paraná.

Palabras clave: Cuenca del Paraná; litósfera; Cratón Río de la Plata; Dominio Río Apa.

Abstract: The Paraná Basin is a large sedimentary basin located in the central-eastern South America that we developed during part of the Paleozoic and Mesozoic eras. Since that, this basin consists of sedimentary and igneous rocks. Commonly, the Paraná Basin is regarded as a typical flexural inter-cratonic basin. Investigating whether Paraná Basin lies on Archean or Proterozoic mantle were rose, based on 1D-Vs profiles (Presser, 2010a y d) and its derivative profile of perturbation of the average velocity $(V_{sv}+V_{sh})/2$ relative to the global 1D AK135 model, inferences point of lithosphere-asthenosphere interface or lithosphere-asthenosphere

boundary (LAB) to 210 points (divided by 2 by 2 degrees and some of 1 by 1 degree). By having a number of spaced points above defined LAB >193.5 to 195km (=LAB depth to denote ages > 2500 Ma, estimated from $z=0.04 \cdot t+93.6$ of Artemieva, 2006), is drafting a cratonic agreement (= Archon). Refined configuration was reached by combining obtained LAB-data with seismic tomography Vs and Ps (published and unpublished), selected data from surface heat flow (unpublished), recorded regional seismic activity, in combination with the gravimetric and magnetometric data (continental scale). Track which outlined irregular and somewhat elongated in NNE-SSW direction a giant cratonic domain that extending between Paraguay-Brazil-Argentina-Uruguay. Archon tectonic influence which was understood as being the Rio de la Plata craton and which is sub divided into 3, inferred, powers Archons: 1-Rio de la Plata, 2 - Paramato and 3 - Paranapanema. At the Rio de la Plata Archon is assigned sub-air or domains: Rio Apa (LAB: ~195-223 Km or = ~3100-2501 Ma.), Rio Paraná (LAB: ~195 -201Km or = ~2900-2501 Ma.) and Rio Uruguay (LAB: ~196-213Km or = ~2700-2510 Ma.). Rio Apa-domain include, in part, exposures of the Alto de Rio Apa where published papers showed U-Pb ages of Lower Proterozoic age and show Archean TDM-age and two records of zircon U-Pb-ages from 3000 to 3028 Ma = Archon-Field at the edges fitted/welded by Proton/Tecton-belts. Rio Apa-domain shown in depth a well-defined, in terms of Vs and Ps, blue-zone (150 to > 250 km) as recognized consistently below major Achaeon cratons with peridotitic cold and depleted-setting. Studies on Capiibary diamond from eastern Paraguay, (at the Archon Rio de la Plata, Rio Apa domain) allowed to derive a residence time of 3.1 Ga (3100 Ma.) in her matrix, a space of depleted peridotitic mantle (hazburgitic or lherzolitic) (Smith et al., 2012). The mentioned data for Archon Rio de la Plata, Rio Apa-domain in Paraguay, would be extended and valid for Rio Parana and Rio Uruguay-domains, considering all applicable geophysical information and consideration in common. So, just as would be extended for Paramato (LAB: ~195-222Km or = ~3050-2501 Ma.) and Paranapanema (LAB: ~195-240Km or = ~3500-2501 Ma.) Archons, both of which are unknown basement exposures since is covered by Paraná Basin sediments.

Keywords: *Paraná Basin; lithosphere; Río de la Plata Craton; Rio Apa-domain.*

INTRODUCCIÓN

Eaton et al. (2009) definen al cratón como la región central de un continente que se ha mantenido estable en más de mil millones de años en la escala del tiempo. Esta referencia es también en relación a grandes dominios Arcaicos, como por ejemplo el cratón Kaapvaal en el Sur de Africa. Brito-Neves, (1995), comenta que en un cratón se presentan como condiciones necesarias: estabilidad relativa, antigüedad y transitoriedad, espesor litosférico privilegiado y bajo flujo termal. Según Morgan (1995) para que las anomalías térmicas litosféricas sean significativas para ventanas del diamante, ellas tienen que tener un diámetro mínimo de cerca de 400 km.

Llevando en consideración las edades que pueden ser reconocidas y agrupadas en los cratones, Janse (1994) los divide en tres mayores elementos:

1-Archon -rocas del basamento con edad del Arqueozoico, y que tienen como su último evento termal la edad de 2500 Ma.

2-Proton - rocas del basamento con edad del Proterozoico tardío a medio (2500-1000 Ma.), y

que tienen como su último evento termal la edad de 1000 Ma.

3-Tecton - rocas del basamento con edad del Proterozoico medio a inferior (<1000 Ma.), y que tienen como su último evento termal la edad del orden de los 800 Ma.

Clifford (1966) afirmaba que kimberlitas con tenores económicamente interesantes de diamantes siempre se encuentra asociados con núcleos tectónicamente estables de cratones donde la corteza posee edad del Arqueozoico (>2400 millones de años) (=Clifford's Rule) =Archones. El Clifford's Rule establece también que las exploraciones de diamantes deberían llevarse a cabo en estas áreas. Esta regla es clara para la mayoría de las grandes minas de diamante (*world class diamond mine*) en el mundo; no así la regla se presenta confusa para algunas grandes minas como es el caso de la lamproita Argyle en Australia y, no menos confuso para la lamproita de Bunker en la India o las minas en kimberlita junto a Orapa (Botsuana), entre otros; dominios donde la información tectónica se presta a debates.

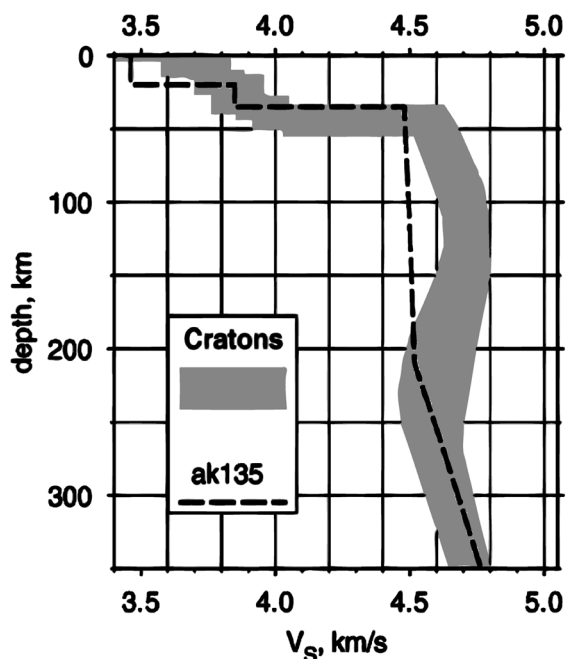


Fig.1. Resumen del perfil de velocidad isotrópica de las ondas S (shear-wave velocity = V_s) en perfil 1D por debajo de cratones como mostrado por Lebedev et al. (2009). Figura que pretende revelar los rangos de valores de V_s (en sombreado) para incluir preferentemente los mejores perfiles obtenidos por debajo de todos los lugares cratónicos que habrían estudiado.

O'Reilly & Griffin (2010) comentan que el manto litosférico cratónico (o SCLM) es fácil de definir, al menos en concepto; i.e. *“es la parte superior no convectiva del manto que yace por debajo de la corteza continental. Constituye la parte más baja de la placa del complejo de la litosfera que se mueve de una manera relativamente rígida en la más caliente y reológicamente más débil astenosfera. La litosfera no es convectiva y por lo tanto se caracteriza por geotermas conductoras. La intersección de la geoterma conductiva con el solidus saturado de líquido peridotítico puede marcar la división de la litosfera en una capa límite superior mecánica y una capa -frontera- inferior térmica, que, aunque débil, todavía mantiene una geoterma conductora”*. La presente interface litosfera-astenosfera o límite litosfera-astenosfera (LAB), también según los comentarios de O'Reilly & Griffin (op cit.) *“se produce en la intersección*

de la geoterma conductiva con la adiabática astenosfera a la temperatura potencial del manto de cerca de 1300 ° C. La composición de la SCLM, como se refleja en xenólitos del manto y la derivada de macizos expuestos, es compleja, ella muestra una depreciación inicial de los componentes basálticos (altos grados bajo cratones, y en menor grado por debajo de cortezas más jóvenes), y las sobreimpresiones geoquímicas posteriores (re-fertilización) por múltiples episodios de fusión y la infiltración de líquidos. Debajo de las zonas cratónicas el manto litosférico es generalmente espeso (150-250 km) y refractario (es decir, rica en Mg y pobre en Ca, Al), por debajo de cinturones móviles jóvenes y zonas extensionales por lo general es más delgado y composítivamente más “fértil” (es decir, pobres en Mg y más ricas en Ca, Al, Fe, Ti y otros componentes “basálticos”)”.

En la litosfera cratónica o SCLM, de acuerdo con Lebedev et al. (2009), las propiedades sísmicas reflejan su composición y su estado físico ofreciendo las condiciones básicas en la arquitectura de los procesos de su formación, y sobre las causas de su estabilidad. La litosfera, en sentido estricto, es una zona de límite mecánicos; donde el LAB coincide con la parte superior de una zona de disociación entre la litosfera y la astenosfera, que es marcada por un aumento de la velocidad de deformación; así una zona de baja velocidad sísmica de ondas S (secundarias o *secundae* = shear-wave velocity) (V_s) a veces se detecta por debajo de una zona de alta velocidad (Eaton et al., 2009). La litosfera sísmológica por debajo de regiones cratónicas habitualmente se caracteriza como una porción anómalamente alta de velocidad V_s ($=V_{sh} + V_{sv}$) desde la profundidad del Moho a 100-300 km (Lebedev et al., 2009; Eaton et al., 2009), su base siendo difícil identificar mediante ondas de superficie (Ondas de Love y Ondas de Rayleigh), debido a las propiedades técnicas de la integración (Eaton et al., 2009). El acceso a la distribución de las velocidades variaría de ruta a ruta; en algunos casos, velocidades V_s siendo más elevadas inmediatamente debajo del

Moho, disminuyendo gradualmente con la pro-

fundidad (Darbyshire & Eaton, 2010). La rúbrica sísmica de la litosfera subcratónica (o SCLM) muestra claramente en las imágenes tomográficas un manto de alta velocidad por debajo del cual las velocidades suelen relajarse gradualmente de nuevo con relación a la media mundial (Darbyshire & Eaton, op cit.); así entendiéndose que esta mudanza de comportamiento sísmico se da en la interfase litosfera-astenosfera. También se puede notar que velocidades Vs son sistemáticamente más elevadas en la litosfera de cratones que en la litosfera de cinturones móviles Proterozoicos (Lebedev y Trampert, 2010).

Queda claro que las velocidades altas Vs se asocian con una litosfera espesa, de raíz fría, re-

fractaria, y el grado de profundidad del manto de alta velocidad se estaría tomando, de cierta forma, como una aproximación del grosor de la litosfera (sismológica) cratónica.

En este trabajo se pretende, basado en la información Vs (perfiles 1D junto a la tomografía sísmica-Vs) y el apoyo de tomografía sísmica Vp (las ondas P -primarias o primae) sumado a otros datos geofísicos (gravimetría y magnetometría), disponibles en la literatura científica publicada y/o en medios on-line de generación de información, sustentados por la información geológica de diversos tipos, estimar la configuración entre el manto Arqueozoico y el Proterozoico o, más propiamente dicho; estimar la profundidad de la raíz de la litosfera (el LAB) bajo la La Cuenca Geológica

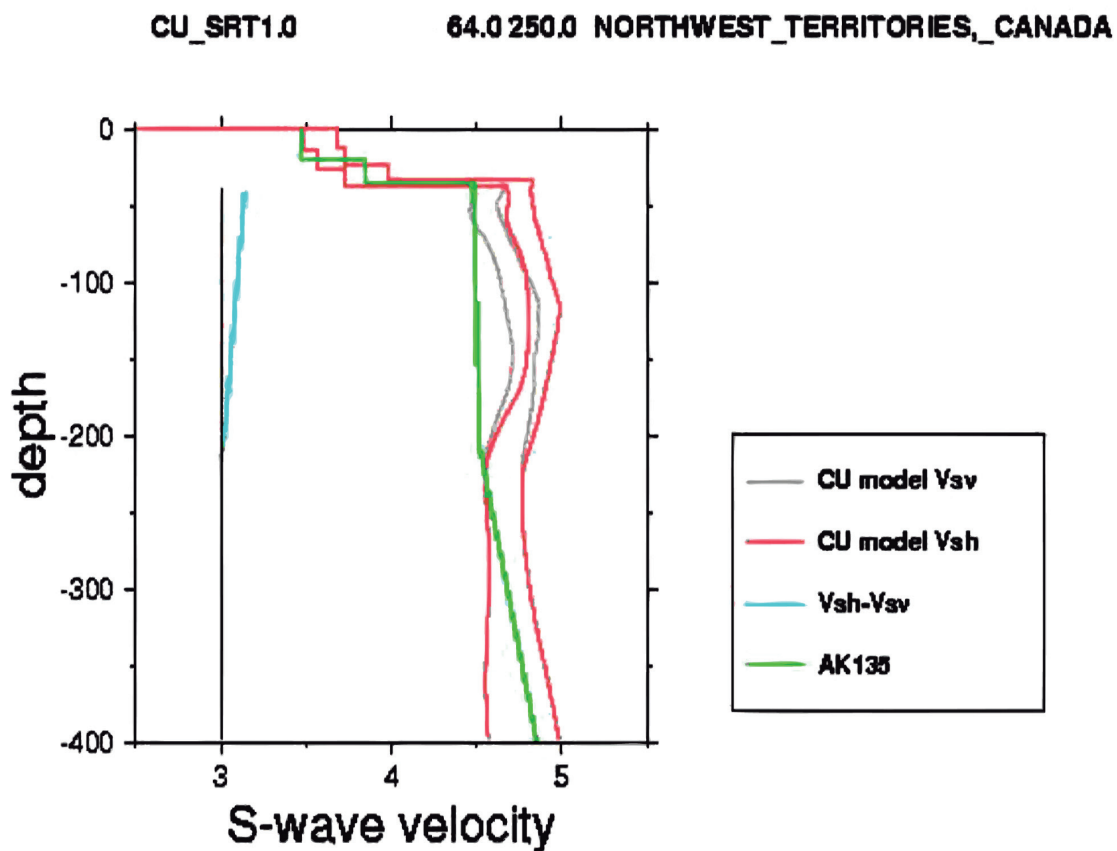


Fig. 2. Perfil de velocidad isotrópica de las Vs en perfil 1D por debajo de una región cratónica próximo a la mina de diamantes Panda en el cratón Slave de Canadá. Se puede observar el comportamiento de Vsv y Vsh en relación al Modelo Global de Referencia AK135. Vsv y Vsh se separan por debajo de los aproximadamente 45-50 Km y se vuelven a unir aproximadamente a los 215 Km, i.e. el espesor del manto litosférico subcontinental?. (Fuente: <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>).

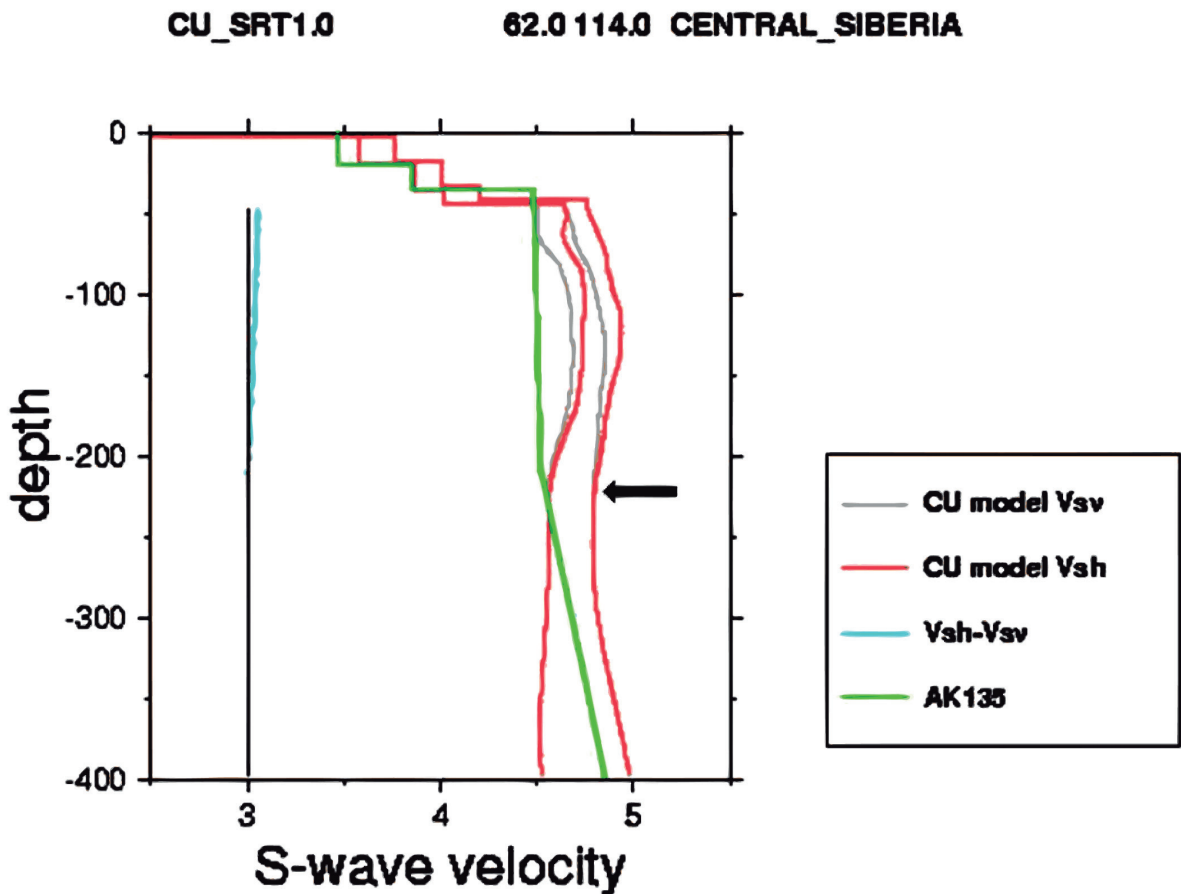


Fig. 3. Perfil de velocidad isotrópica de las Vs-1D por debajo de una región cratónica próximo a algunas de las ricas minas de diamantes en el cratón Siberiano (Rusia). Se muestra como las velocidades Vsv y Vsh después de los 150 Km se relajan gradualmente con relación a AK135. Obsérvese las varias definiciones (de disminución de la velocidad Vs), antes de alcanzar la línea recta vertical y bien expresiva (se señala por la flecha, por debajo de los 200 Km). Fuente: <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>.

Del Paraná, o simplemente Cuenca del Paraná.

LAB VISTO EN PERFILES 1D DE VS (=1D-VS): MÉTODO DE ESTIMACIÓN DEL LAB

Según Lebedev et al. (2009), la anisotropía sísmica de la litosfera en los cratones sería el reflejo de la estructura creada en el momento en que ellos experimentaron una fuerte deformación, durante su formación y estabilización y, comentan además que, la mayoría de los trabajados hablan de una anisotropía radial en el cratón que sería consecuencia de la fábrica horizontal orientada ($V_{sh} > V_{sv}$). SCLM donde un aumento de la velocidad

de Vs (>4.55 Km/S) entre el Moho y los 100 a 150 km de profundidad es visto como probablemente debido a las transformaciones de fases, en particular, la transición de la espinela-peridotita a granate-peridotita, propuestas a la que previamente se le atribuyo, dentro de este intervalo de profundidad, como la "discontinuidad" de Hales (Lebedev & Trampert, 2010); Fig.-1 según Lebedev et al. (2009).

La Fig.-2, corresponde a un perfil 1D-Vs (<http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>). Esta figura muestra los corredores resultantes de valores aceptables de Vsv y Vsh, velocidad estimada a

partir del modelo de Monte-Carlo, procedimiento que es indicado del mismo modo en <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>. El perfil fue obtenido, a partir de la citada página, próximo a la mina de diamantes Ekati, junto al cratón Slave en Canadá. En la Fig.-2 se puede observar:

-Vs es de alta velocidad entre Moho y los 250 Km, igual a lo mostrado en sombreado en la Fig.-1, siendo que, esta alta velocidad se relaja gradualmente, de nuevo con relación a la media mundial (i.e. AK135 =Modelo Global de Referencia, de Kennett et al., (1995), citado en <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>). O como ya indicado más arriba, (Eaton et al., 2009), la litosfera sismológica por debajo de regiones cratónicas habitualmente se caracteriza como una porción anómalamente alta de velocidad Vs desde la profundidad del Moho a 100-300 km. Esta Fig.-2 resalta que tanto Vsh como Vsv se abren en 2 brazos paralelos y de diferente velocidad.

-Los brazos paralelos de Vsh y Vsv por debajo de los 50 Km aproximadamente se separan, donde se ve que $Vsh > Vsv$ por unas decenas de kilómetros. Brazos, que luego se vuelven a unir y en este punto de unión se funden en una línea recta de velocidad (en este caso mostrado por debajo de los 200 Km) que puede ser visto groseramente como un patamar de la velocidad de Vs. Poco después la Vs se acelera rápida y constantemente a lo largo de la profundidad.

-La línea de referencia AK135 intercepta, luego de adquirir aceleración en velocidad, poco después de los 200 Km a Vs.

Eaton et al., (2009), véase también Darbyshire & Eaton, (2010), estimaron, en regiones cratónicas (Arqueozoicos/Paleoproterozoicos), el LAB a partir de perfiles 1D-VS, (se interpreta que toman la intersección de la línea VS con la línea AK135 como indicativo del LAB). Por su lado Presser (2010a y d), basado en el trabajo de Eaton et al.,

(2009), también a partir perfiles 1D-VS (Según CU_SRT1.0 (=Ray tomography) –Anisotropic, dado en <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>) presento un método simple de estimación del el LAB; i.e.: tomar como LAB el último punto de disminución de la velocidad (Km/seg.) Vsh (borde de mayor velocidad), específico luego de las varias definiciones, antes de alcanzar la línea recta que por debajo de la cual, nuevamente, Vs experimenta un aumento constante y progresivo de su velocidad. Esto se comprende mejor al observar las Figs.-2 y 3.

Presser (2010a y d) observo que los valores de las profundidades del LAB estimados, en regiones cratónicas y en los terrenos Proterozoicos, versus las edades (en millones de años) muestran una relación directamente proporcional; i.e., a mayor edad mayor profundidad (Fig.-4). Los datos plotados se alinean perfectamente a lo largo de una recta (Fig.-4). Presser (op cit.) también indico que la recta trazada es compatible con la observación y ecuación-de-la-recta previamente definida por Artemieva (2006) i.e.: $z=0.04*t+93.6$ (Donde z es el espesor termal de la litósfera en km y t es la edad en Ma.).

Por lo arriba resaltado se revela la buena resolución como método de aproximar, probablemente con escaso rango de error, el LAB al emplear perfiles 1D-VS. Si llevando en consideración el hecho que espesores superiores a 193,5 Km representarían los de un SCLM Arqueozoico (o cratón), inferidos a partir de la ecuación-de-la-recta $z=0.04*t+93.6$ y que también puede ser deducido de lo indicado en la Fig.-4 (195 Km). De esta forma se podría, al contar con un número espaciado de puntos donde se definieron LAB superiores a 193,5-195 Km., trazar una configuración cratónica Arqueozoica en una región dada. Este procedimiento ya fue testado por Presser (2010a, b, c, d y e), ver también la observación similar realizada Darbyshire & Eaton (2010) para la región del cratón Superior en Canadá. Con todo, el cratón Sino-Korean, es uno de los cratones que rompe los esquemas sísmicos para la estimación del LAB y numerosos comentarios al respecto pueden ser

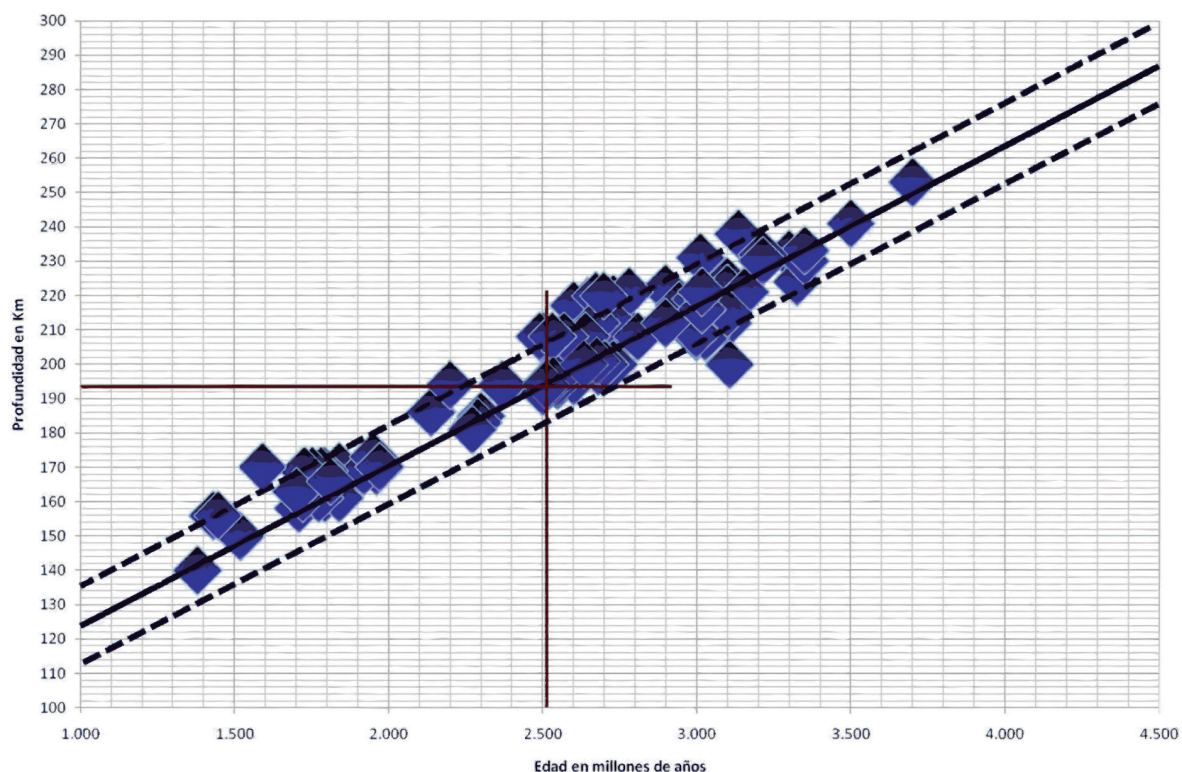


Fig. 4. Profundidad estimada de la raíz de los cratones (espesor litosférico o LAB) obtenidos a partir de 1D-Vs en versus edades (Ma.) como trazado por Presser (2010) y parcialmente modificado. Para esta estimación y simetría a lo largo de la recta se contemplaron selectas edades del interior de los Cratones-Archon (Numero de datos alrededor de 100, de las más diversas fuentes publicadas: Kalahari, Slave, Hearne, Labrador, Siberiano, Karelia, Sao Francisco, Guaporé, Guyanas, Kasai-Congo, Man, Wyoming, Norte de Australia, etc.) sumándose a los datos estimados porciones Archon/Proton (Bloque Rio Apá, W-Slave, S-Rio de la Plata, etc.). Esta simetría mostraría la efectividad de la estimación del espesor litosférico a partir de 1D-Vs y; del mismo una aproximación (inmediata) de la edad de cratonización en zona de plataforma-cratónica. La recta trazada es, aproximadamente, compatible con la ecuación-de-la-recta ya previamente definida por Artemieva (2006) i.e.: $z=0.04*t+93.6$ (Donde z es el espesor termal de la litósfera en km y t es la edad en Ma.). Sin embargo, del grafico puede deducirse que el espesor LAB Arquezoico es del orden mínimo de 195 Km. Las flechas indican los materiales más antiguos conocidos: zircón detrítico en Jack Hills, Western Australia. ($4,404 \pm 8$ Ma)(Wilde, et al.; 2001) y el Acasta Gneiss en el “Canadian Shield” Northwest Territories, Canadá (4.031 ± 0.003 Ga.)(Samuel, 1999); donde las líneas de trazo discontinuo (horizontal) junto indican el espesor inferido. De esto se deduce un LAB máximo para los cratones del mundo no alcanzaría los 300 Km.

pinzados en Chen & Zhang (2011).

ESCENARIO GEOTECTÓNICO DE LA CUENCA DEL PARANÁ

La Plataforma Sudamericana es considerada como totalmente formada en el evento Pan Africano (o Brasiliano de 900-490 Ma.) (Schobbenhaus et al., 1984; Hasui, 2010). Esta plataforma posee composición compleja, reflejo de la histo-

ria polisíclica de su basamento, desde el Paleoarcheozoico (ca. 3,5 Ga.) al Ordovícico Temprano (ca. 500-480 Ma.) (Schobbenhaus & Brito Neves, 2003); mega-estructura donde son reconocidos, en principio, 4 crátones: Amazônico, São Luís, São Francisco y Rio de la Plata (Brito-Neves & Cordani 1991; Brito-Neves et al. 1996; Janse 1985; Svisero 1994; Trompette 1994). Posteriormente también encuentran importancia la Provincia Bor-

borema (Schobbenhaus & Brito Neves, 2003; Me-deiros et al., 2003) y el de cratón Paraná (Cordani et al., 1984) o Parapanema (Quintas, 1995). Así como también el bloque Pampia, entre otros me-nores como puede leerse en, por ejemplo, Ramos et al. (2010).

La Cuenca del Paraná, es una amplia cuen-ca sedimentaria situada en la porción centro-este de América del Sur. Su área de ocurrencia alcan-za principalmente el centro-sur de Brasil, desde el estado de Mato Grosso hasta el estado de Rio Grande do Sul, donde alcanza cerca de 75% de su distribución de área. A más del Brasil, ella tam-bién se distribuye por el noreste de la Argentina, en la porción este del Paraguay y en el norte de Uruguay. Es una depresión ovalada, con el eje ma-yor casi norte-sur, y posee un área de cerca de 1,5 millón de km². Ella se desarrolló durante parte de las eras Paleozoica y Mesozoica y su registro sedimentario comprende rocas depositadas del Pe-

ríodo Ordovícico al Cretácico, alcanzando un in-tervalo de tiempo entre 460 e 65 millones de años atrás. Su espesor máximo, superior a 7000 m en su porción central, es constituida por rocas sedimen-tares e ígneas. La Cuenca del Paraná es una típica cuenca flexural de interior cratónico (extracto de lo encontrado en http://pt.wikipedia.org/wiki/Bacia_do_Paran%C3%A1). La Fig.-5 bosqueja los límites de la Cuenca del Paraná y se indican las exposiciones más relevantes del basamento crista-lino Arqueozoico-Proterozoico.

El cratón Rio de La Plata fue definido por Al-meida et al. (1973) englobando la porción Uru-guay y los alrededores de la Sierra de Tandil en la Argentina. Posteriormente, fue extendido rum-bo al norte (Fragoso-Cesar & Soliani, 1984) para incluir, sucesivamente: las ventanas de Rivera, al oeste, y Acegúa, al este, localizados en el interior de la Cuenca Del Paraná, próximas a la frontera Uruguay-Brasil; en el este de Rio Grande do Sul

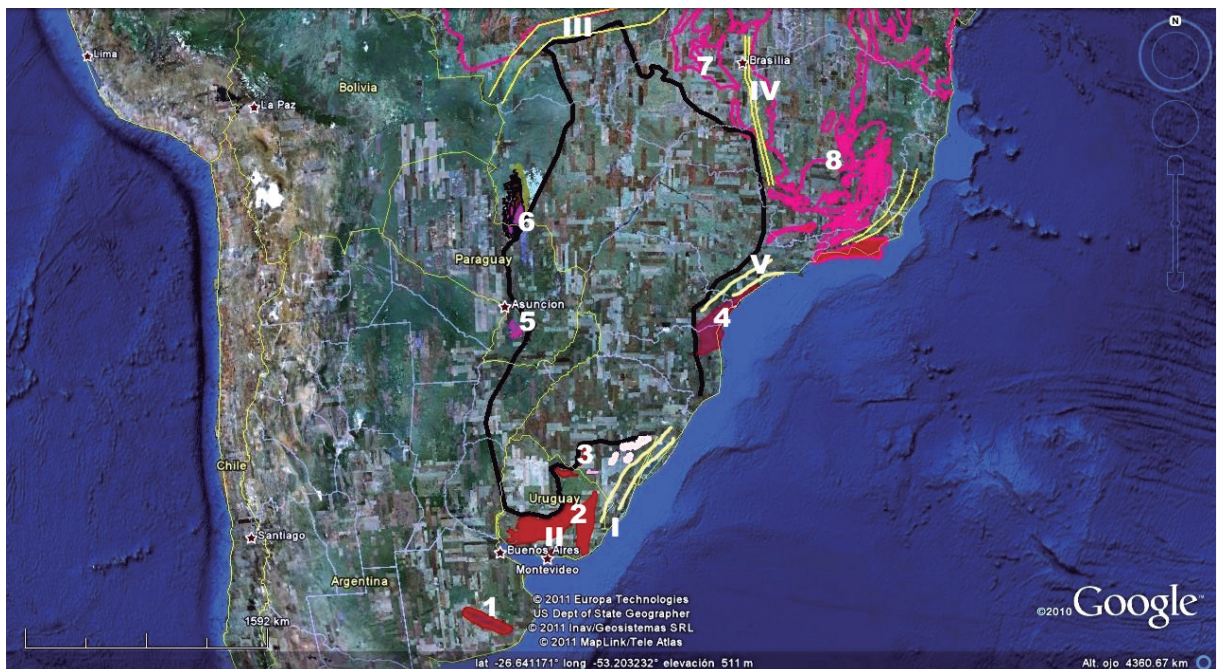


Fig. 5. Bosquejo aproximado de la Cuenca del Paraná (líneas de negro) y su relación con la exposición de las más relevantes rocas cristalinas del basamento Arqueozoico-Proterozoico (líneas/áreas llenas de púrpura o en violeta claro): 1-Sierra de Tandil, 2-Terreno Piedra Alta, Terreno Nico Pérez, Terreno Tijucas 3- Rivera, Acegúa, Taquarembó, Encruzilhada, São Gabriel; 4- Luis Alves, Curitiba, Paranaguá; 5- Alto de Caapucú; 6- Macizo Rio Apá; 7- Macizo de Goias; 8-Craton São Francisco. Y los cinturones de: I- Dom Feliciano, II-Montevideo- San José- Arroyo Grande; III-Paraguai-Araguaia; IV-Brasilia; V-Riviera. Mayores comentarios ver el texto.

el bloque Taquarembó, y los bloques Encruzilhada y São Gabriel; y finalmente, en el norte, el bloque cratónico llamado de Luís Alves (Trompette, 1994). Fig.-5. Como indicado anteriormente, al respecto trabajos de síntesis son encontrados, por ejemplo, en Ramos et al. (2010), Hasui (2010), entre otros. Fig.-5.

El llamado Cráton Rio de La Plata de “Almeida et al”, está bien representado en Uruguay (Dalla Salda et al., 1988; Hallinan et al., 1993; Trompette, 1994, Fragozo Cesar & Machado, 1997; Cingolani et al., 1997), siendo contornado al ESE por el cinturón Dom Feliciano (Basei, 1985; Trompette, 1994; Chemale et al., 1997); y sin límites a WNW entonces cubierto por las rocas sedimentarias de la Cuenca del Paraná (Trompette, 1994). Aquí el cráton consiste de una amplia asociación de Terrenos del Arqueozoico/Proterozoico, soldados por fajas móviles mas nuevas. Los terrenos del Arqueozoico/Proterozoico Inferior (>2 Ga.) incluyen complejos de rocas granitoides con islas de diversas litologías de rocas metamórficas conocidos como Terrenos de Piedra Alta (Cingolani et al. 1997) o también como Terreno Tijucas (Fragoso Cesar & Machado, 1997, ver asimismo Chemale, et al., 1997) y el Terreno Nico Pérez (cf. Hallinan et al., 1993). Entre los terrenos antiguos se conocen tres mayores fajas móviles: Faja San José, Faja Montevideo y Faja Arroyo Grande (Cingolani et al., 1997). En la parte norte do Uruguay y en el Brasil ocurren dos ventanas del basamento antiguo compuesto por rocas ígneas y metamórficas, Rivera y Acegúa (2272±33 Ma.) (Soliani, 1986). En Rio Grande do Sul se tiene el bloque Taquarembó, consistiendo mayormente de rocas metamórficas Transamazónicas 1980 a 2370 Ma., y las de edad Pb/Pb 2541±167-169 Ma., indicando la existencia de un pequeño núcleo Arqueozoico (Trompette, 1994). Juntándose a ellos, entre los estados de Santa Catarina y Paraná, son encontrados tres mayores dominios tectónicos (Basei et al., 1992): Luís Alves (2.3-3.1 Ga.), Curitiba (2.3-2.8 Ga.) y Paranaguá (~1.97 Ga.) (Basei et al., 1997; Siga Jr. et al., 1997; Harara et al., 1997). Dominios entre los cuales se conocen terre-

nos de “fajas móviles” del Proterozoico como la Faja Ribeira (Cordani et al., 1984; Brito-Neves & Cordani, 1991; Quintas 1995) con edades de 1.08-2.2 Ga., que están compuestas por rocas metamórficas de diversas litologías y meta-volcánicas, siendo polisíclicos y estuvieron reactivados en la orogénesis Brasiliana como mostrado por las intrusiones granitoides (Guimarães, 1995) y los del cinturón Dom Feliciano, que cabalga sobre a margen sur del bloque Luís Alves (Mantovani et al., 1987; Basei, 1985; Basei et al., 1997). Porción tectónica sintetizada en los trabajos publicados en en Vizzi et al. (2003), Hasui (2010), entre otros. Aquí también, tanto para este bloque Luís Alves como para los de Curitiba y Paranaguá, como comentado en el caso de Uruguay, se puede pensar como que se tratan de pedazos del basamento con raíces Arqueozoicas que están soldados por “fajas” de terrenos Proterozoicos. Fig.-5.

En el Sur, el cráton Rio de la Plata de “Almeida et al” reaparece en la Argentina en las Sierras de Tandil, donde habría sido probablemente alzado por fallas. Este basamento del ciclo Transamazónico (2200 Ma., Echeveste et al., 1997) está expuesto por alrededor de 200 km a través de numerosas pequeñas islas, que raramente exceden los 50 km² de extensión. Compuesta de rocas metamórficas de diversas litologías próximo a la ciudad de Tandil (Trompette, 1994). Complejo del basamento afectados por series tecto-metamórficas y/o eventos magnéticos, mayormente radiométricamente definidos, oscilando entre 2150 (Echeveste et al., 1997) y 1520-1700 Ma. (Trompette, 1994; Echeveste et al., 1997.) con la última orogénesis (?) alrededor de 900 Ma. (Trompette 1994). Fig.-5.

El fragmento del basamento expuesto en la región de Asunción (Paraguay) correspondería a la porción W del cráton Rio de La Plata de “Almeida et al” (p/ex. Cordani et al., 1984; Trompette, 1994). Aquí ocurre el llamado Alto de Caapucú (cf. Proyecto PAR 83/005, 1986), constituido por rocas cristalinas metamórficas e ígneas de diversas litologías (Kanzler 1987; Cubas et al., 1997). El Precámbrico Sur de Paraguay, que indica una evolución geotectónica en el que un fragmento



Fig. 6. El Alto (o Macizo) Rio Apá. Dicho de manera simplificada, en este macizo se han reconocido: 1-Complejo de rocas metamórficas (I-gneis máficos y migmatitas, rodeados al oeste, por (II-) granitos gnéissicos. Donde, ambas unidades gnéissicas están cortadas por cuerpos irregulares de (III-) granitos.); 2-Complejo de rocas meta-sedimentarias y meta-ígneas (Unidad Centurión); 3-Grupo Itapucumí (calcáreos equivalentes, en parte, a los del Grupo 7) –Paraguay. Y en Brasil: 4- Complejo Rio Apá; 5-Grupo Alto Tererê; 6-Grupo Amoguijá (a-Suite Intrusiva Alumizador y b-Suite Volcánica Serra da Bocaina); 7-Grupos Cuiabá, Corumbá y Jacadigo – Formação Urucum 8-Faja de Deformación Paraguai. Mayores comentarios son dados en el texto. Base de la cartografía Geológica es conforme encontrado en Hutchinson (1979) y Lacerda Filho, et al. (2006). Para la posición estratigráfica de las unidades recurrir al texto.

continental de alto-grado Paleo-proterozoico (zircones dieron edades (207Pb/206Pb) de 2023 ± 12 a 2028 ± 10 Ma.; registrándose además en sus núcleos de alrededor de 2650 Ma.; como también nucleó migmatítico de que acusó edad TDM de 2700 Ma., Cordani et al., 2001) fue intensamente re-trabajado durante la orogénesis Neo-proterozoica del Ciclo Brasileño (Cordani et al., op cit.). Aquí también, como comentado con relación a los terrenos del Uruguay y los terrenos de Rio Grande do Sul, Santa Catarina y Paraná, los dominios del cratón Rio de la Plata poseen pedazos de bloques Arqueozoicos “envueltos/soldados” por fajas Proterozoicas; y en sus límites registran eventos tecto-termales del Brasileño. Rochas sedimentarias de la Cuenca del Paraná delimitan tanto al norte como al este las rocas del Alto de Caapucú.

Al norte, en la región fronteriza con el Brasil

ocurre el llamado Alto de Rio Apa (cf. Proyecto PAR 83/005, 1986), Precámbrico Norte de Paraguay, constituido por rocas cristalinas metamórficas e ígneas de diversas litologías. Al Alto de Rio Apa se acostumbra, mayormente, a verlo vinculado al Cratón Amazónico (Presser, 2005a y b; Cordani et al., 2005; Lacerda Filho, et al., 2006; Godoy et al., 2009; entre otros) o como un bloque cratónico independiente del Cratón Amazónico (Presser, 2008 y 2010b, c y e). Con todo, Cordani et al. (2010) consideran al Alto de Rio Apa o Macizo Rio Apa como un fragmento cratónico situado entre el estado de Mato Grosso do Sul de Brasil y el norte del Paraguay-Oriental; macizo que comprende rocas metamórficas de medio grado del Paleo-mesoproterozoico, intruidas por rocas granitoides, y se encuentran cubiertas por las deposiciones de los Grupos Neoproterozoicos Corumbá

e Itapucumí. Siendo que su porción al este está bordeado por la parte sur del Cinturón Paraguai y más al sur por los sedimentos de la Cuenca del Paraná y algunas islas de sedimentos del Grupo Itapucumí (Cordani et al., 2010). El Macizo Rio Apa cuando abordado desde el punto de vista de la Geología del Brasil, el es percibido como formado por las rocas del Complejo Rio Apa, del Grupo Alto Tererê y del Grupo Amoguijá (con la Suite Intrusiva Alumiador y la Suite Volcánica Serra da Bocaina). Al este y el oeste ocurren las rocas meta-vulcano-sedimentarias de la Faja de Deformación Paraguai constituidas en la región por los grupos Cuiabá, Corumbá y Jacadigo – Formação Urucum (Godoy et al., 2009; Lacerda Filho, et al., 2006; Cordani et al., 2010). Ahora bien, en territorio del Paraguay, se considera que el trabajo de Hutchinson (1979), mismo que hayan trabajos posteriores (por ejemplo Wiens, 1996), nordea, adecuadamente, la geología del basamento cristalino del Alto de Rio Apa (Fig.-6):

1-Complejo de rocas metamórficas (CRM), con tres unidades: I-gneis máficos

y migmatitas, rodeados al oeste, por (II-) granitos gnéissicos. Donde, ambas unidades gnéissicas están cortadas por cuerpos irregulares de (III-) granitos.

2-Complejo de rocas meta-sedimentarias y meta-ígneas, que están bordeando en el oeste a CRM. Meta-vulcano-sedimentos, que fueron reunidas por bajo la denominación de Unidad Centurión. Para el conjunto meta-vulcano-sedimentario se estimaron espesores de varios miles de metros (alrededor de 6000). El citado autor, expone aun, que rocas granitoides expuestas en masas de algunos kilómetros, aflorando kilómetros más al sur cortan a las rocas de la Unidad Centurión. Cordani et al. (2010), aparentemente basado en el trabajo de Lacerda Filho, et al. (2006), sugiere que este Complejo de rocas meta-sedimentarias y meta-ígneas serian equivalentes al Grupo Amolar vinculado al orógeno Mesoproterozoico Sunsás. Otros comentarios a este respecto ver además en Godoy et al. (2009)

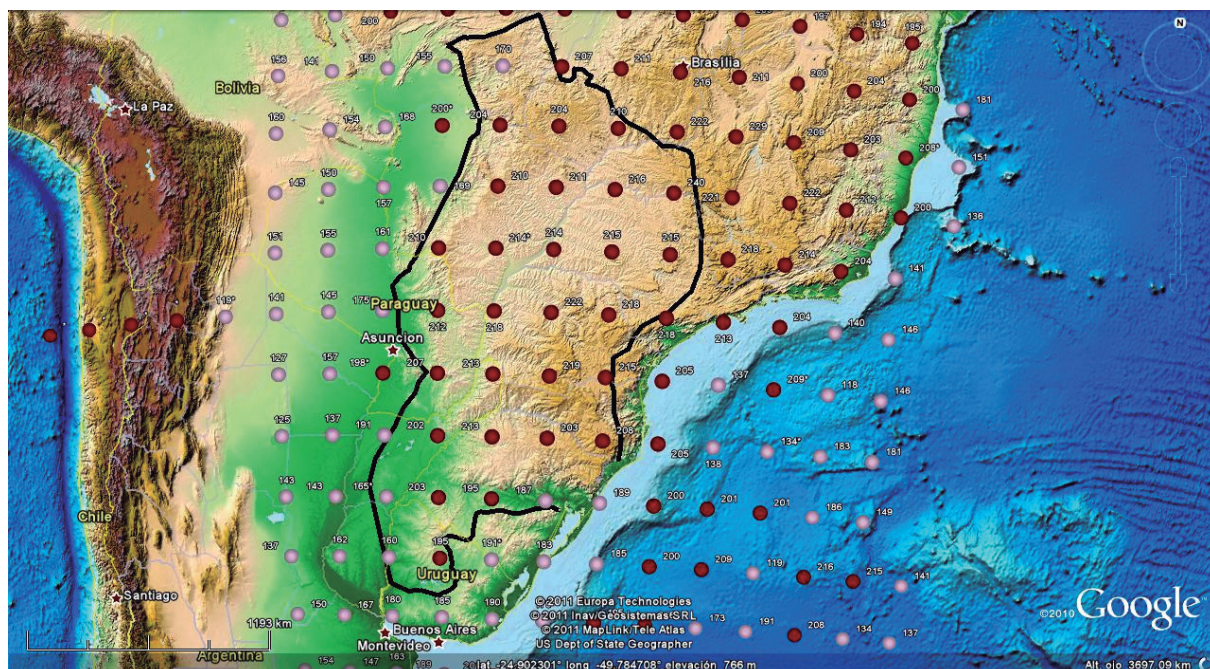


Fig. 7. Bosquejo aproximado de la Cuenca del Paraná (líneas de negro) y alrededores, donde los puntos llenos indican valores calculados de LAB (en Km) a partir de en perfiles 1D-Vs (Presser, 2010a y b) para una malla de 2 en 2 grados. Puntos oscuros representan LAB >195 Km y claros aquellos cuyos valores son menores al mismo.

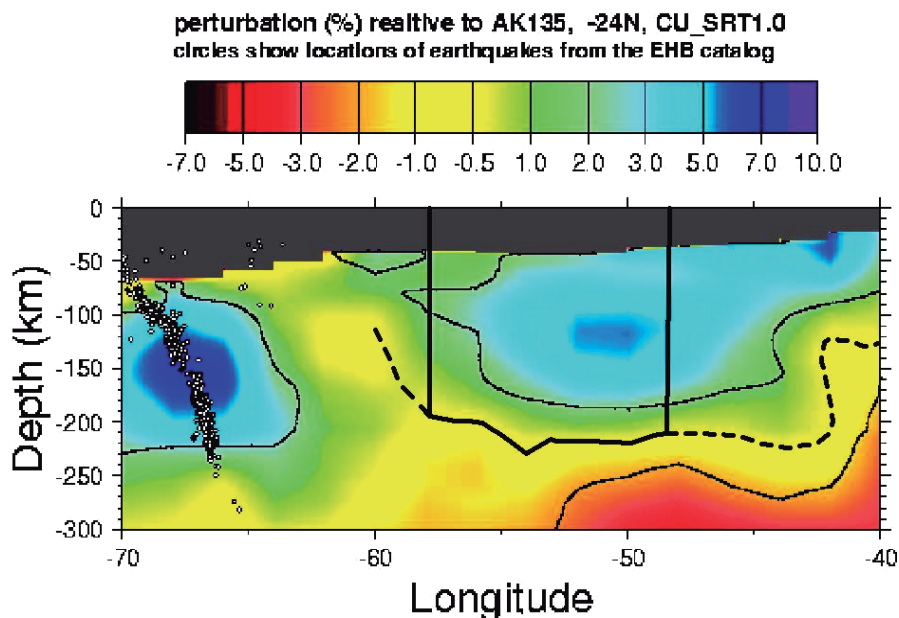


Fig. 8. Perfil vertical a lo largo de la latitud -24 que reproducen colores que muestran la perturbación de la velocidad media $(V_{sv} + V_{sh})/2$ con respecto al modelo global 1D AK135 (Según CU_SRT1.0 (Ray tomography –Anisotropic, extraído de <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>). Se observó que los valores de LAB obtenidos en 1D-Vs coincidían sistemáticamente con valores de $(V_{sv}+V_{sh})/2$ en -0,5%, del rango de perturbación (-7 a +10); por esta razón se tomó este valor, como indicado por la línea de trazo continuo (=área cratónica según 1D-Vs, a partir de las Fig.-11 y cuyos atribuidos límites E-W son indicados por las líneas verticales) a discontinuo (a la derecha como a la izquierda del trazado continuo), como indicativo del LAB. En el borde W la distribución sísmica junto a la Cordillera de los Andes (pequeños cuadros); ya la línea llena horizontal-subhorizontal es indicativa del espesor de la corteza (20 a 70 Km).

y Presser (2010c).

De todos modos, para el Macizo Rio Apa (Paraguay-Brasil) los trabajos de Sato (1998), Lacerda Filho, et al. (2006) y Cordani et al. (2010) contribuyen en las informaciones geocronológicas que son sintetizadas a seguir:

Complejo Rio Apa: en su parte situada al norte presenta edades U-Pb (zircón) de 1950 Ma.; donde orthogneisses del tipo Caracol presenta edades U-Pb entre 1774 a 1700 Ma.- y edad TDM (o edades Sm-Nd) de 2570 (JV-1D, Biotita-gneis, en Lacerda Filho, et al.; 2006) a 1930 Ma.

Grupo Alto Tererê: presenta edad U-Pb (zircón) de 1752 Ma. y TDM entre 2228-2226 Ma.

Grupo Amoguijá: con las Suite Alumiador con edad U-Pb de alrededor de

1850 Ma. y TDM de 2530 a 1870 Ma. Y la Suite Serra da Bocaina que presenta edad U-Pb (zircón) 1794 Ma. y TDM de 2340 a 1960 Ma. (Fig.-6).

De acuerdo con lo que es leído en Lacerda Filho, et al. (2006), posterior a la generación del Arco Magmático Amoguijá, posiblemente relacionado a la acomodación y colapso de ese arco, ocurrió un magmatismo tolehítico intra-placa continental, representado por los cuerpos intrusivos de la Serra da Alegria (gabro y anortosita), del Morro do Triunfo (gabros) y por los enjambres de diques y sills básicos. Donde una datación U-Pb (SHRIMP realizada en zircón) de la roca anortositica del cuerpo Serra da Alegria proporcionó edad Paleoproterozoica de 1791-1788 Ma. y edades TDM: 2640 a 2238 Ma. A mas de todo esto, dos edades Arqueozoicas U-Pb obtenidas en zircones: 3028

Ma. (Serra da Bocaina, JV-04, interpretado como xenocrystal incorporado, por Lacerda Filho, et al., 2006) y 3000 Ma. (Zircón detrítico en diamigrita glaciogenica de la formación Puga, al Sur del Cinturón Paraguai, en el Brasil; Babinski et al., 2008). Datos geocronológicos que hacen suponer la presencia de una fuente Arqueozoica; este contenido ya es insinuado por las edades Sm-Nd que más atrás ya fueron comentadas. Alto de Rio Apa que también, como comentado con relación a otros terrenos del cratón Rio de la Plata poseen pedazos de bloques “Arqueozoicos” “envueltos/soldados” por fajas Proterozoicas.

Estas características donde masas del basamento Arqueozoico son invadidas o intruidas por rocas del Paleo-proterozoico al Eo-proterozoico pueden ser observados también en los cratones de São Francisco (Texeira, 1992), Amazônico (Tassinari, 1996), como también en cratones de otras partes do mundo (ex. Kaminsky et al., 1995; Helmstaedt & Gurney, 1995; White et al., 1995; Darbyshire & Eaton, 2010; entre otros). Esto es; pedazos de

Terrenos Arhcon quedan entre ellos soldados/encajados por fajas Proton y Tecton (terrenos Proterozoicos, que en parte, se habrían generado (edad TDM) de rocas de los terrenos Archon).

LA RAÍZ DE LA LITOSFERA BAJO LA CUENCA DEL PARANÁ

En la Fig.-7 se presentan los valores de LAB que fueron calculados a partir de (Vs), en perfiles 1D-Vs, como propuesto por Presser (2010a y d) y que ya fueron comentados en el ítem anterior, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores para una malla de 2 en 2 grados.

Así mismo, datos Vs en perfiles verticales a lo largo de la longitud o de la latitud que reproducen colores que muestran la perturbación de la velocidad media Vs con respecto al modelo global 1D AK135 (Según CU_SRT1.0 (Ray tomography –Anisotropic) pueden ser derivados en <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/> (= (Vsv + Vsh)/2). Estos datos, así mismo, fueron practicados de 2 en 2 grados para la Cuenca del Paraná y

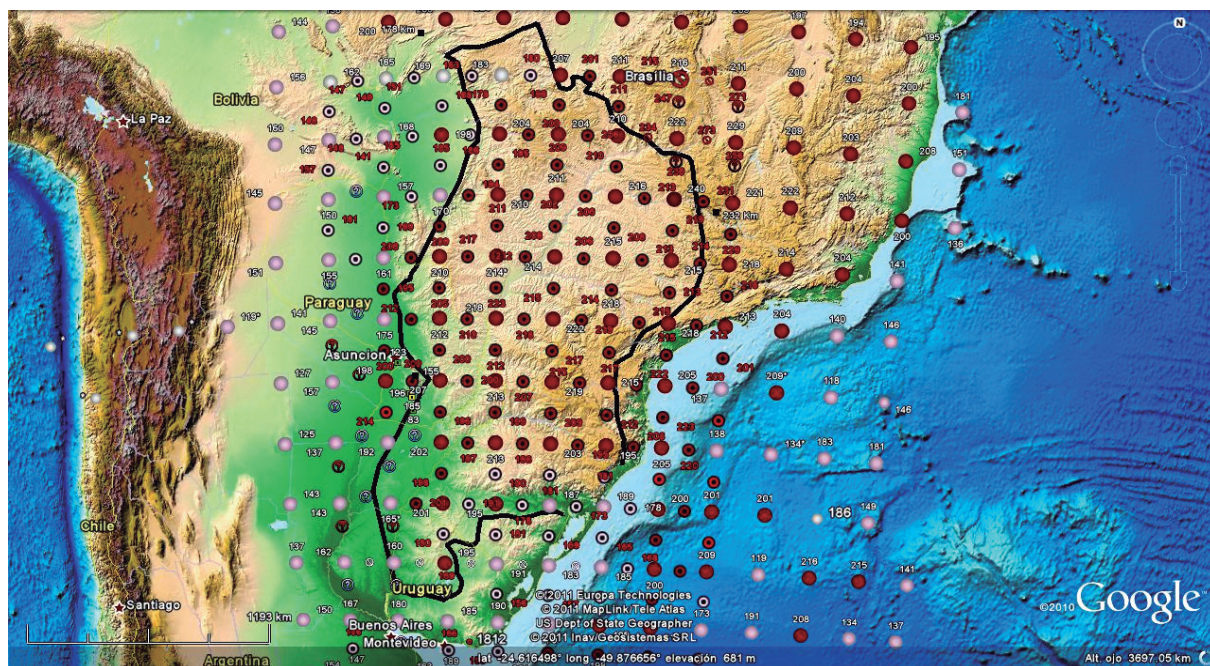


Fig. 9. Bosquejo aproximado de la Cuenca del Paraná (líneas de oscura gruesa) y alrededores, en ella indicándose el calculado de LAB según método indicado en la Fig.-7 y nuevos valores en puntos obtenidos a partir de los perfiles (VSV + Vsh)/2 con respecto al modelo global 1D AK135 (Según CU_SRT1.0 (Ray tomography –Anisotropic, que pueden ser obtenidos en <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>), procedimiento indicado en la Fig.-8. Simbología como en la Fig.-7.

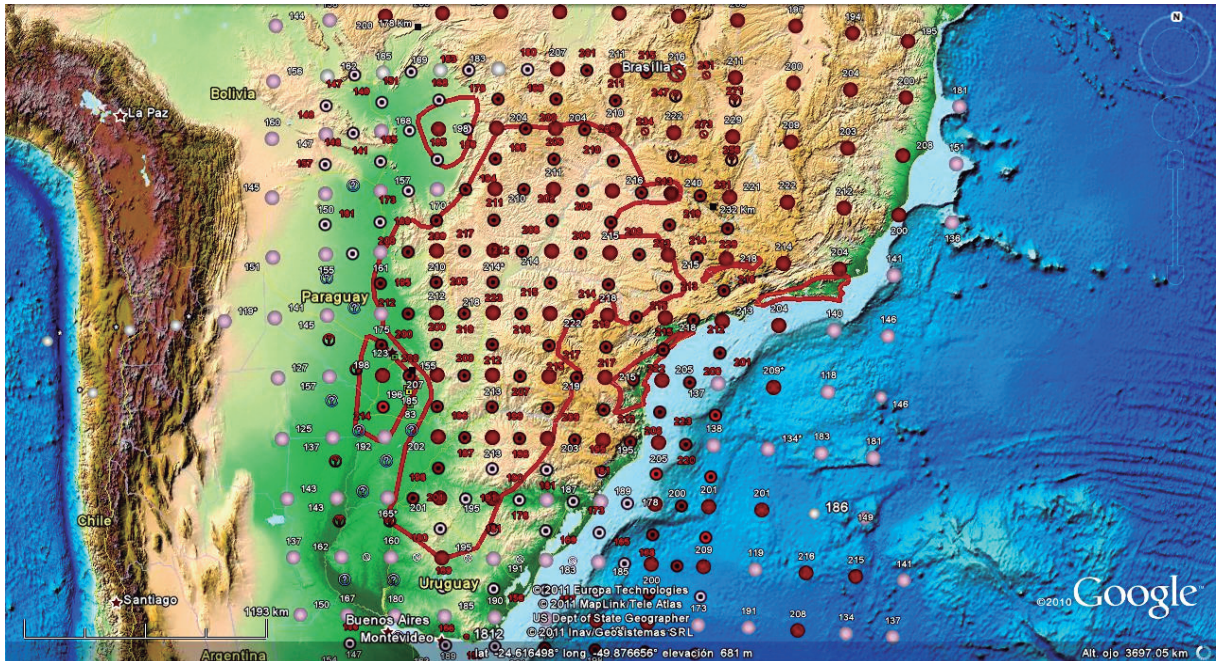


Fig. 10. Configuración aproximada del cratón (bosquejado en línea gruesa), junto a la Cuenca del Paraná y alrededores trazada con base a los datos de LAB, como mostrado en las Fig.-9; a partir de la configuración previa dada por Presser (2010).

alrededores. Con cuanto que se pudo observar que los valores de LAB obtenidos en 1D-Vs coincidían sistemáticamente con valores de $(V_{sv} + V_{sh})/2$ en $-0,5\%$, del rango de perturbación del -7 a $+10\%$ (indicado por <http://ciei.colorado.edu/~nshapiro/MODEL/>), mas estimaciones del LAB pudieron ser inferidas. A modo de ejemplo de este procedimiento se da la porción de latitud -24 , entre -70 a -40 de longitud, en la Fig. 8. Así con esto en mano, se pudo obtener, para numerosos otros puntos, distintos nuevos valores de LAB, con una proximidad de 1 en 1 grado; hecho que ayudo a configurar una malla más densa de puntos. Esta nueva malla se muestra en la Fig.-9. Entretanto estos datos obtenidos a partir de $(V_{sv} + V_{sh})/2$ puede resultar inaplicables para algunos puntos y siendo así se los obvia en la Fig.-9.

De esta forma los datos que fueron calculados a partir de 1D-Vs y $(V_{sv} + V_{sh})/2$ espaciados en 210 puntos (de los cuales ~ 120 espaciados de 2 en 2 grados y entre ellos ~ 90 puntos de 1 en 1 grado) permitieron inferir un amplio LAB en/bajo a la Cuenca del Paraná y alrededores. Valores de LAB,

presentados en la malla de la Fig.-9, accedieron derivar una probable configuración cratónica, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores, como previamente ya trazada en Presser (1998, 2005, 2008, 2010a, b, c d y e) y los trabajos de Cordani et al. (1984) y Quintas (1995). Esta, nueva más pulida configuración cratónica junto a la Cuenca del Paraná y alrededores, es mostrada en la Fig.-10. Disposición cratónica afinada con base a la información gravimétrica continental (http://topex.ucsd.edu/WWW_html/mar_grav.html, Fig.-11), información del campo magnético total continental (EMAG2 disponible en: <http://www.gettech.com/downloads/WDMAM.htm>, Fig.-12), distribución sísmica continental (datos extraídos de; <http://earthquake.usgs.gov/earthquakes/>, Fig.13), una colección de seleccionados datos de flujo de calor superficial continental (construidos a partir de datos disponibles en: <http://www.und.nodak.edu/org/ihfc/index.html> y referencias indicadas en esta página. Fig.-14) y de la cartografía geológica publicada e inédita.

Dado que el Vs con alta velocidad entre 100

a > 193,5-195 Km implicaría un manto frío, i.e. cratónico; para el mayor refinamiento de la información del flujo de calor superficial, los datos fueron seleccionados con ayuda de un mapa de tomografía sísmica Vs para 200 Km (de Rocha, 2008). Este procedimiento es por cuanto que las Vs serían sensibles a la temperatura (por ejemplo, Xu et al., 2007; Lebedev & Trampert, 2010; entre otros), y además, se considera que el espesor de 200 Km refleja claramente un ambiente Arqueozoico (193,5 Km = 2501 Ma., deducido a partir de la fórmula $z=0.04 \cdot t + 93.6$ ya comentada en el ítem II o 195 Km según lo indicado en la Fig.-4). La selección se hizo necesaria dada la observación de Artemieva (2006) que indica sobre el bajo porcentaje de confiabilidad de las informaciones del flujo de calor superficial levantadas para América de Sur (i.e. apenas el 20%). Así se seleccionaron, tan solo, temperaturas menores a 45°C situadas por encima de la información de tomografía Vs +0,30% (blue-zone) como cratónicas y temperaturas mayores a 45°C situadas encima de la informa-

ción de tomografía Vs menor a 0,30% a negativas como no cratónicas (Fig.- 14).

Trabajos de tomografía sísmica, que muestran excelente correspondencia de los blue-zone profundos (Vs y Vp, fundamentalmente entre los 150 a 300 Km; entendido como indicativo del rango de la ventana del diamante y al mismo tiempo de un manto peridotítico frío (Vs) y depletado (Vp)) con raíces cratónicas del Arqueozoico fueron fomentados a partir de trabajos en el cratón de Kaapvaal (por ejemplo, James & Fouch, 2002; Fishwick, 2009) y que se extendieron al cratón de Yakutia (Priestley & Debayle, 2003), el cratón Slave (Snyder et al. 2004), entre otros. La Fig-15 muestra el comportamiento de tomografía sísmica Vs y Vp entre los 150, 200 y 250 Km por debajo de una buena porción de la configuración cratónica (Fig.-10) junto a la Cuenca del Paraná y alrededores; tomándose para ello las informaciones disponibles en Rocha (2008) y Rocha et al. (2011). Otro conjunto de informaciones tomográficas también pueden ser encontradas en Escalante (2002), Ro-

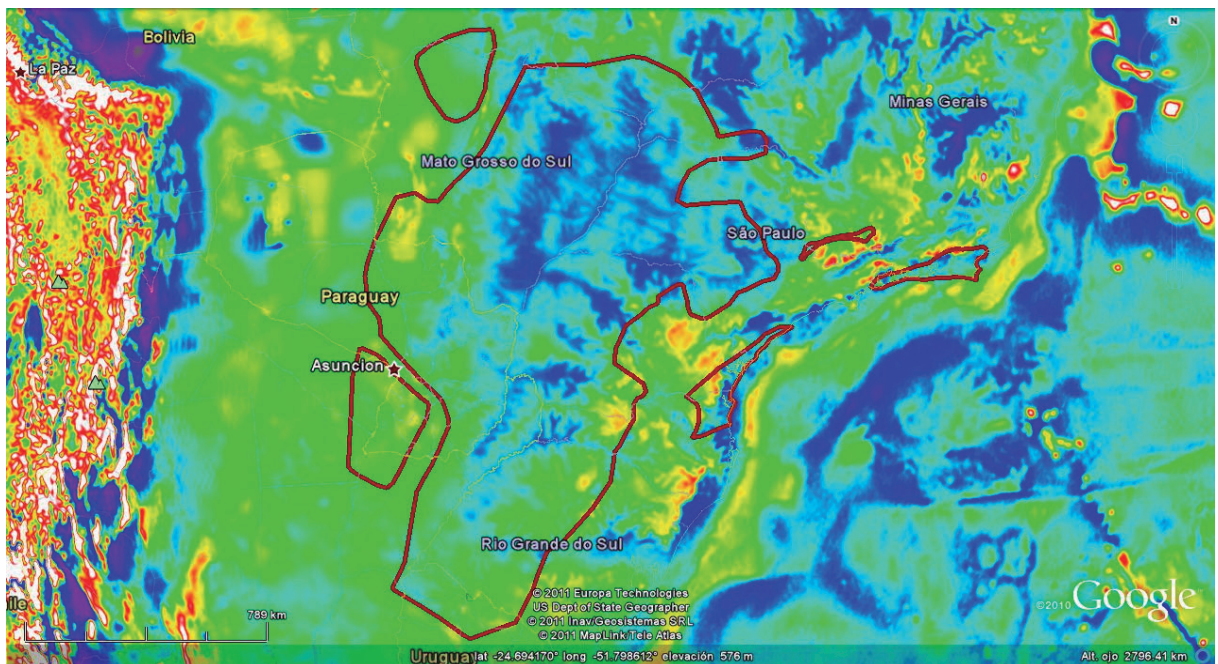


Fig. 11. El cratón, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores como en la Fig.-10, en un mapa de gravimetría de satélite (Free-air-anomalies). Altos gravimétricos en verde-amarillo (=0 mgal) a rojo-rojo blancuzco y valores negativos gravimétricos en verde-celeste a azul-violeta (Fuente: EGM2008 http://earth-info.nga.mil/GandG/wgs84/gravitymod/egm2008/anomalies_dov.html).

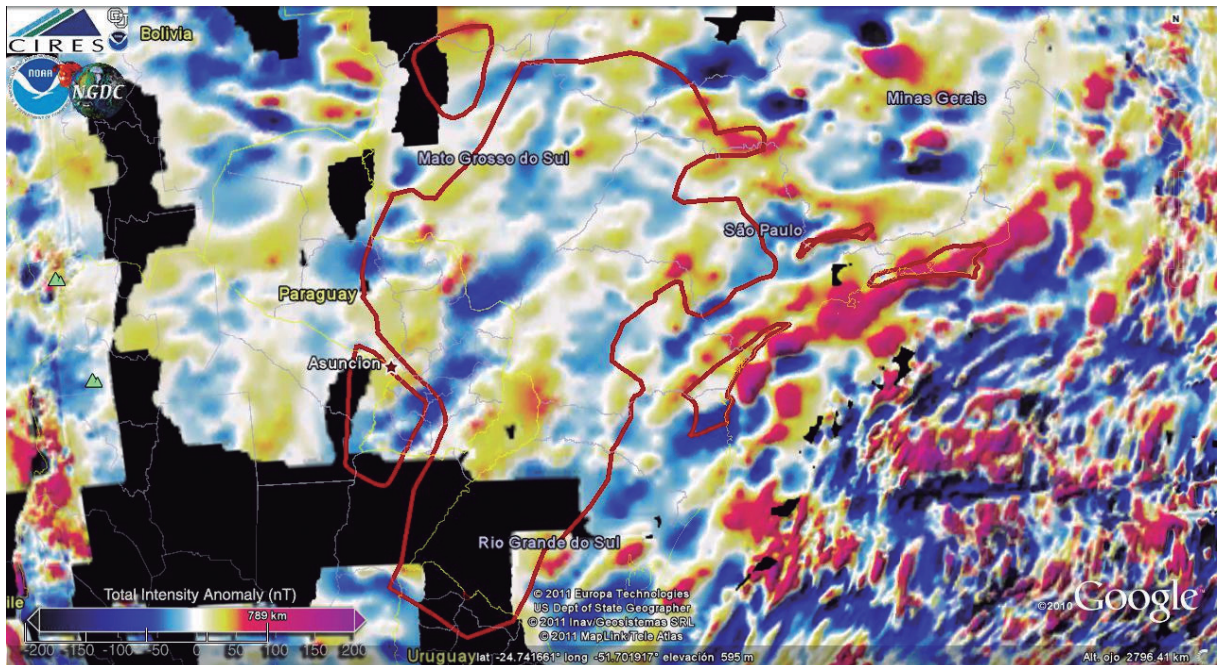


Fig. 12. El cratón, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores como en la Fig.-10, en un mapa de campo magnético total (EMAG2: <http://geomag.org/models/emag2.html>).

cha (2003), Schimmel et al. (2003), Heintz, et al. (2005), entre otros. La presencia de blue-zone profunda puede ser claramente observada por debajo de una buena porción de la bosquejada probable configuración cratónica (Fig.-10) junto a la Cuenca del Paraná y alrededores, sobre todo en la región comprendida entre el Paraguay-Brasil-Argentina (Fig.-15).

A todo mas, junto al Alto de Rio Apa fueron lanzadas las edades U-Pb y las edades Sm-Nd Arqueozoicas (comentadas en el ítem anterior), sobre un mapa de tomografía Vs a 200 Km; observándose que todas las edades Sm-Nd y la edad de 3028 Ma. (JV-04, medida junto a la Serra da Bocaina) se sitúan en/junto a la blue-zone (>0,3%) (Fig.-16). Tan solo la edad de 3000 Ma. se posiciona en una porción, próxima, más lenta de Vs. A la coincidencia de estas edades (TDM o U-Pb) Arqueozoicas con el blue-zone a los 200 Km, se lo ve como claramente indicativo de que un SCLM Arqueozoico subyace al basamento expuesto junto a una importante porción del Alto de Rio Apa. LAB en 208 Km fue estimado a partir de $(V_{sv}+V_{sh})/2$ para

la coordenada situada junto a los citados valores geocronológicos (Fig.-10), donde 208 Km deducidos de la formula $z=0.04*t+93.6$ representa 2860 Ma.; o calculado en la Fig.-4 =2800 Ma. La edad de 3000 Ma., como ya comentado, fue levantada (Babinski et al., 2008) en de sedimentos y por lo mismo se piensa que sufrió un transporte desde su fuente original que se piensa haya sido la del Alto de Rio Apa; i.e. un SCLM Arqueozoico.

Todavía por otro lado, la Región Oriental del Paraguay desde 1960 en adelante viene siendo cada vez más reconocida la presencia de diamantes junto a fuentes primarias como en ambientes secundarios (Presser, 2011); mostrando con esto, de forma indirecta, un probable manto subyacente con un espesor mínimo en torno de los 150 Km (o un basamento de edad mínima de formación de ~1410 Ma.). De todas formas, las ocurrencias de diamantes se dan sobre la probable configuración cratónica bosquejada en la Fig.-10. En este camino, los primeros estudios sobre los diamantes de Capiibary/Paraguay, (en/junto a la probable configuración cratónica de Figs.-10 a 15), realiza-

dos por Smith et al. (2012), permitieron inferir un tiempo de residencia de 3.1 Ga. (3100 Ma.) de este mineral en su matriz; un aposento de manto peridotítico (hazburgítico o lherzolítico) depletado. Considerando la fórmula $z=0.04 \cdot t+93.6$ (ver ítem II) se puede inferir a partir de 3100 Ma. un espesor de LAB de ~218-222 Km y por lo mismo próximo a los valores estimados para esta región con base a 1D-Vs y $(V_{sv}+V_{sh})/2$ (ver Fig.-10 y 11)

De esta forma, las Figs.-10 a 15 mostrarían un gigante dominio cratónico de alrededor de ~1610 X 835 Km (en sus bordes de mayor largo y ancho) con forma irregular y algo alargada en dirección NNE-SSW. Esto en parte coincidente por lo ya apuntado, para la misma gran área, por Presser (2010b, c y e); dominio tectónico al que se entendió como siendo el Cratón Rio de la Plata. Terreno Archon aparentemente continuo y en sus bordes encajados/soldados por fajas Proton y Tecton.

Presser (2010b c y e) al Cratón Rio de la Plata sub dividió en 3, inferidas, potestades Archons: 1-Rio de la Plata, 2- Paramato y, 3- Parapananema

(Fig.-17).

El área regional ocupada por el Archon Parapananema es aproximadamente equivalente a las inferencias de domino cratónico ya levantadas en Cordani et al., (1984); Quintas, (1995); Mantovani et al, (2005) (Fig.-17); ver también discusiones en Rocha, (2008) y Rocha et al. (2011).

El área regional ocupada por el Archon Rio de la Plata es parcialmente coincidente con parte del concepto original de Craton Rio de la Plata de "Almeida et al" y modificaciones conceptuales posteriores (ver comentarios del ítem III) al englobar (Fig.-10 a 15) las porciones de Rivera, Acegua y Tacuarembó. Sin embargo, la configuración Archon de la Fig.-10 a 15 excluye al bloque Archon Luis Alves (Fig.-17). Ver también otras discusiones mencionadas en Rocha (2008) y en Rocha et al. (2011).

Al área regional ocupada por el Archon Paramato, Presser (2010b, c y c) interpreto como pareciendo ser un belt formado en el Arqueozoico (?), a partir de la colisión entre los Archons Rio de la

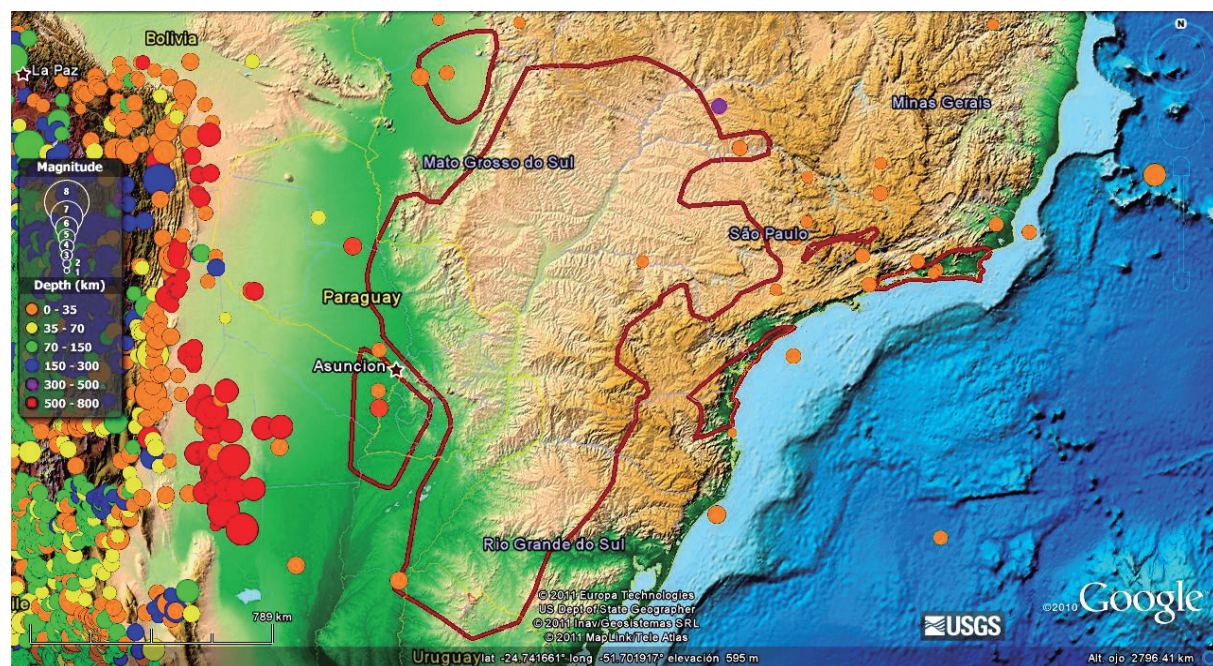


Fig. 13. El cratón, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores como en la Fig.-10, en relación a los principales sismos (región de la Cordillera del los Andes al oeste) registrados por la USGS (<http://earthquake.usgs.gov/earthquakes>) a lo largo de décadas. Resulta clara la condición a-sísmica del cratón bosquejado en la Fig.-10, Observándose apenas alguna actividad sísmica en sus bordes.

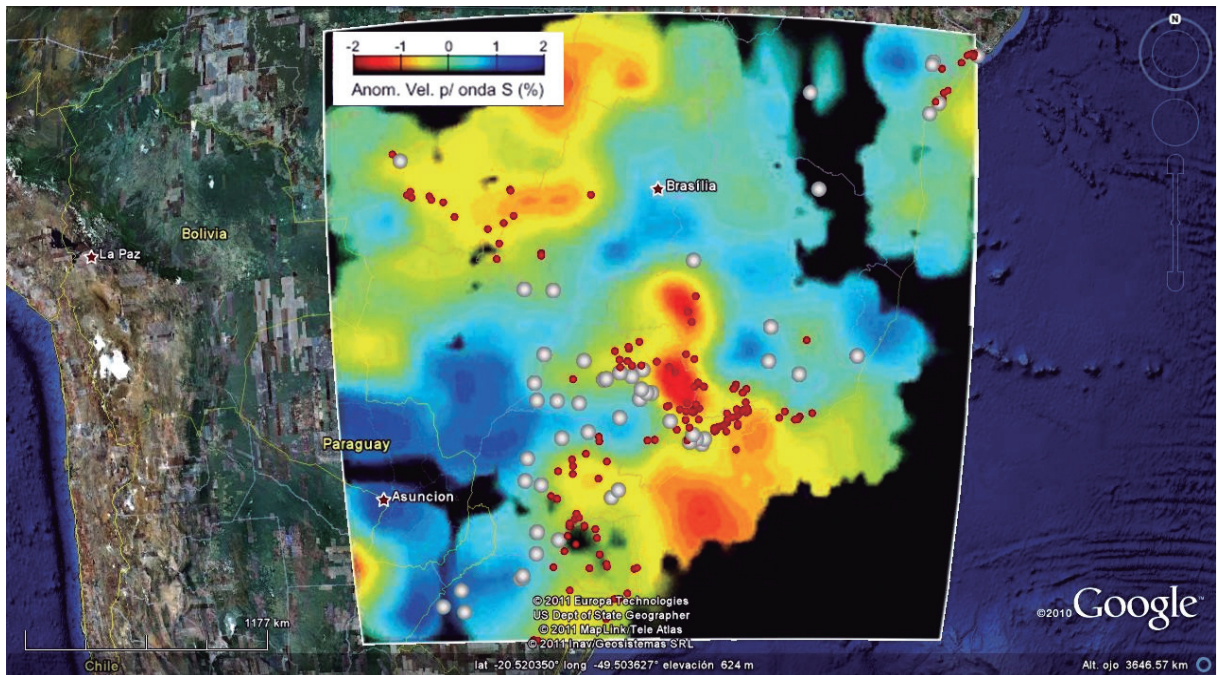


Fig. 14. Junto a la Cuenca del Paraná y alrededores bien seleccionados flujos de calor frío cratónico (<40) a próximo al cratónico (40-45) (ambos en círculos claros grandes); caliente o no cratónico (>45-50) a muy caliente (>50) (ambos en círculos oscuros pequeños); colocados en un mapa de tomografía sísmica de las ondas S para 200 Km (Tomografía sísmicas de Rocha, 2008), esto por cuanto que las Vs son sensibles a la temperatura. Como se puede ver los valores seleccionados cratónicos se hicieron coincidir con la zona de alta velocidad (blue -zone) y valores no cratónicos con zonas de baja velocidad.

Plata y Paranapanema. Ello descifrado a partir de 1D-Vs y de la tomografía sísmica (V_p y V_s).

En la configuración del Archon Rio de la Plata Presser (2010b. c y e) asigno sub-aéreas regionales (Fig.-17): Rio Apa, Rio Paraná y Rio Uruguay; los que en adelante serán referidos como dominios. Siguiendo este principio, el Dominio Rio Apa englobaría, parcialmente, las exposiciones del Alto de Rio Apa y se prolongaría por todo el dominio SCLM Arqueozoico inferido del Paraguay Oriental (y una porción del Occidental) y la parte del sur del Brasil (Estados de Paraná-Mato Grosso do Sul). El Dominio Rio Paraná se extendería por parte de la Argentina (Provincias de Misiones y fracción norte de Corrientes) y la parte del sureste del Brasil (Estados de Paraná, Santa Catarina y el norte de Rio Grande do Sul). Ya por su vez el Dominio Rio Uruguay englobaría la porción norte del Uruguay y la porción contigua en Brasil (suroeste del estado de Rio Grande do Sul) (Fig.-17).

Por otro lado, valores de LAB estimado en la

región del Pantanal de Mato Grosso sugieren un pequeño (aparentemente de ~240 Km X 220 Km, Fig.-10) aislado bloque cratónico relativamente espeso (185 a 198 Km de profundidad) y por ello se infiere una edad de formación Arqueozoica a Paleo-proterozoica. Este pequeño-bloque se sitúa al norte del Alto del Rio Apa y a ambos los separa terrenos delgados de entre 140 a <190 Km (i.e. Proterozoicos). Estos datos de LAB entre/los alrededores del cinturón Neoproterozoico Alto Paraguai-Jacadigo-Paraguai estarían lejos de sustentar la continuidad del cratón Amazonico rumbo al Macizo del Rio Apa.

Al norte, junto al Archon Paranapanema, se sitúa el Arco Magmatico de Goias y más al este la Faixa Brasilia. Entre la Faixa Brasilia y el Craton Sao Francisco la definición $(V_{sv}+V_{sh})/2$ es confusa; como también lo es junto al área de Socorro-Guaxupe, por lo que los datos de la geología (Medeiros et al., 2003) fueron útiles para apuntalar los límites entre Paranapanema-Sao Francisco.

Al este entre el Archon Luis Alves y los Archons Paramato – Paranapanema es bien conocida la Faixa Riviera, para la que se atribuye un piso de formación de 2200 Ma (Cordani et al., 1984; 2001; 2011; Medeiros et al., 2003, entre otros). Área que si bien definida por la geología; es también bien definido en términos de 1D-Vs o $(V_{sv}+V_{sh})/2$ un LAB profundo a muy profundo, como típico de dominios del Arqueozoico. No así la tomografía sísmica (V_p y V_s) que definen áreas de baja

velocidad y la marcada presencia de valores de flujo de calor no cratónico y algunos valores cratónicos (Fig.-14) son fuertes indicadores de faja móvil o ambiente no Archon; aunque también podría deberse a los efectos dejados por una pluma de manto fósil como estimado por VanDecar et al. (1995) para las proximidades de la Faixa Riviera o ser debido a la instalación de un mega-complejo ígneo junto al cratón, como ocurrió en el cratón de Kaapvaal cuando se instaló el magmatismo de

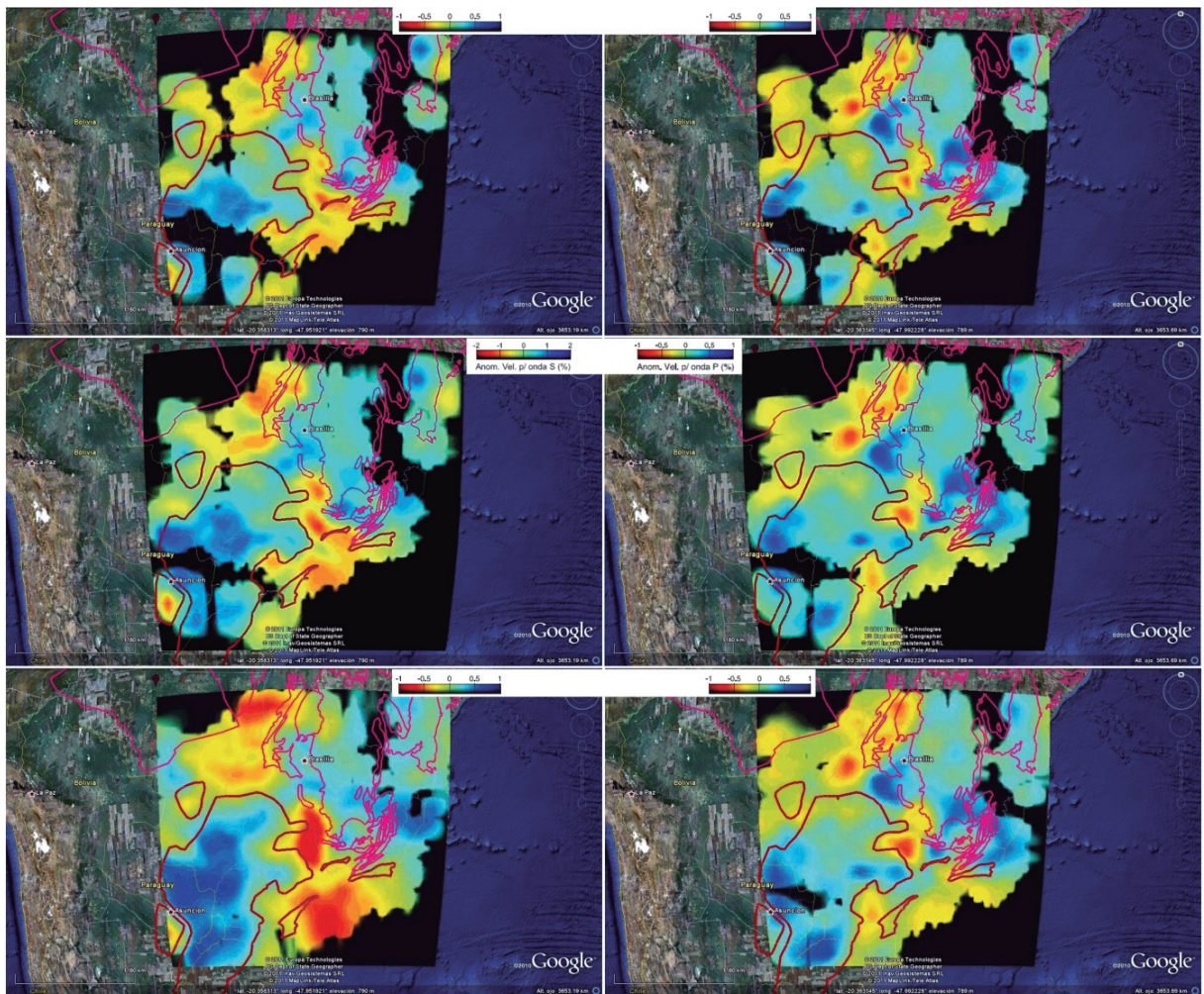


Fig. 15. El cratón, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores como en la Fig.-10, en una base de tomografía sísmica V_s (izquierda) y V_p (derecha) donde se puede claramente observar la coincidencia del dominio Arqueozoico con zonas de alta velocidad (blue-zone). Kilómetros de profundidad desde arriba abajo: 150 (valor que correspondería al inicio del campo de estabilidad del diamante), 200 (profundidad aproximada del dominio Arqueozoico de blue-zone =35%) y 250 (valor como indicativo de referencia del LAB de la mayoría de los cratones en el mundo como indicado en la Fig.-4). Blue-zone en V_p es generalmente interpretado como siendo debido a un manto-depletado. Datos de tomografía sísmica pertenecientes a Rocha (2008) y Rocha et al. (2011).

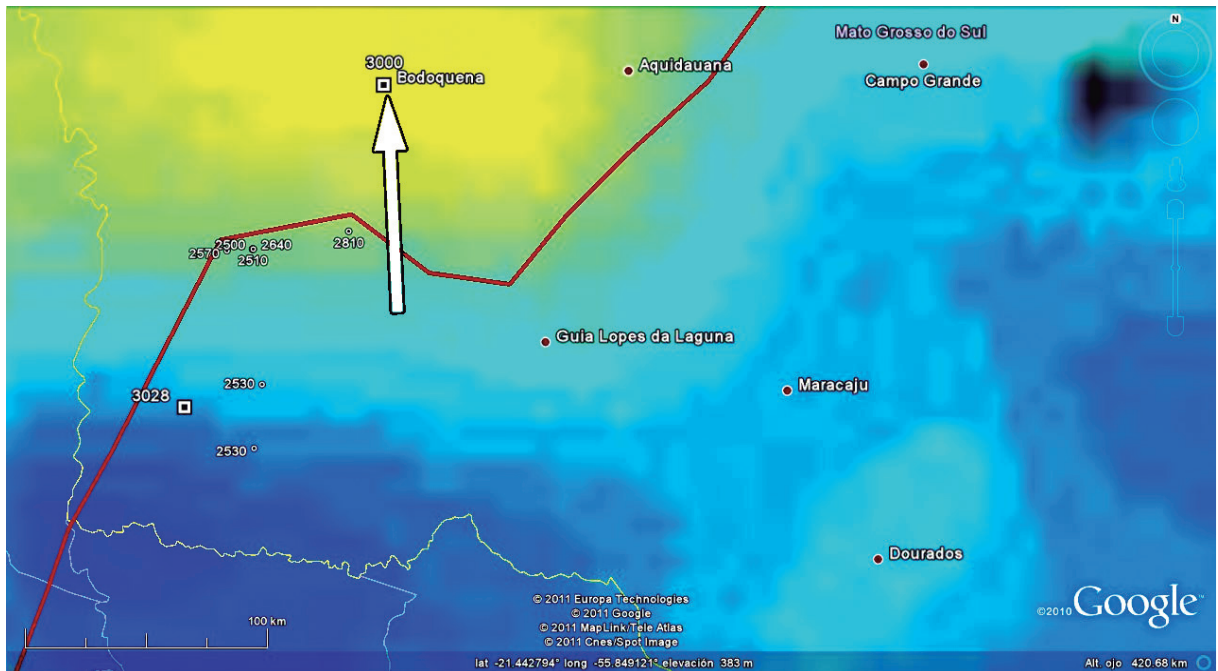


Fig. 16. Porción NW del cratón, junto a la Cuenca del Paraná y alrededores como en la Fig.-10, en una base de tomografía sísmica Vs a 200 Km donde fueron lanzadas las edades U-Pb y las edades Sm-Nd Arqueozoicas (comentadas en texto). La figura muestra como todas las edades Sm-Nd y la edad de 3028 Ma (JV-04, medida junto a la Serra da Bocaina) se sitúan en/junto a la blue-zone. Interpretado como indicativo de que un SCLM Arqueozoico subyace al basamento expuesto junto a una importante porción del Alto de Rio Apá. LAB en 208 Km fue estimado a partir de $(V_{sv}+V_{sh})/2$ para la coordenada situada junto a los citados valores geocronológicos (Fig.-10), donde 208 Km deducidos de la formula $z=0.04*t+93.6$ representa 2860 Ma.; o calculado en la Fig.-4 2800 Ma. Tan solo la edad de 3000 Ma. se posiciona en una porción, próxima, más lenta de Vs; dato que fue levantado (Babinski et al., 2008) en de sedimentos y por lo mismo se piensa que sufrió un transporte (como sugerido por la flecha) desde su fuente original que se piensa haya sido la del Alto de Rio Apá; i.e. un SCLM Arqueozoico. . Datos de tomografía sísmica pertenecientes a Rocha (2008).

Bushveld (por ejemplo, James & Kaapvaal Working Group, 2011). En principio este sector se ve contradictorio y el mismo merecería estudios refinados en el futuro para que contribuyan con una mejor definición.

La parte sur del Archon Rio de la Plata, junto al Dominio Rio Uruguay, muestra valores de LAB de entre 195 a 201 Km (1D-Vs) y en algunos puntos entre 190 a 198 $(V_{sv}+V_{sh})/2$. Esto hace pensar en que la porción Rio Uruguay podría ser más bien un Archon re-trabajado o re-worked Archon como inferido/definido en Mallmann (2003). De este modo, se piensa que este sector igualmente merecería estudios refinados en el futuro. Por ahora en este trabajo la porción es englobada como parte continua del Archon Rio de la Plata y para ellos se lleva tan solo en consideración de peso los valores

de LAB a partir de 1D-Vs. Con todo, más al sur, entre el borde Archon Rio de la Plata y Terrenos de Piedra Alta, Terreno Tijucas, Terreno Nico Pérez y las Faja San José, Faja Montevideo y Faja Arroyo Grande (ver ítem III) se dan valores de LAB inferiores a 190 Km (Fig.-10 a 15), es decir una litosfera mas del tipo (paleo) Proton. Entre el Archon Luis Albes y el Dominio Rio Uguay, como mostrado en la Fig. 5, el cinturón Don Feliciano es ubicado.

Como comentado en el ítem III el fragmento del basamento expuesto en la región de Asunción (Paraguay) corrientemente es visto como la porción W del cratón Rio de La Plata. De acuerdo a la configuración de 1D-Vs o $(V_{sv}+V_{sh})/2$ y los datos aportados por la geología (ítem III) y la tomografía sísmica (Fig.-14), se piensa que el Alto

de Caapucú podría tratarse de un pequeño bloque cratónico/micro-placa Arqueozoico/Paleoproterozoico (de ~300 Km X 250 Km, Fig.-10 a 13, 15 y 17). Al bloque Archon Rio de la Plata como este Alto de Caapucú los separaría una aparente delgada faja donde se ubica el rift de Asuncion (Degraff & Orué, 1984 y Degraff, 1985); este un belt donde se concentra marcadamente el magmatismo alcalino Mesozoico a Cenozoico (Bitschene, 1987; Presser, 1992; 1998; Comin-Chiaromonti, & Gomes, 1995; entre otros)(Fig.-18). La presencia de nefelinitas Mesozoicas en el perímetro E (por ejemplo en Estancia Guavira-y, Comin-Chiaromonti et al., 1997) y de numerosas nefelinitas/fonolitas (extremamente alcalinas) Cenozoicas en el perímetro NNW (Asunción y alrededores, Bitschene, 1987; Bitschene & Presser 1988, DeMarchi et al., 1988; entre otros) (Fig.-18) serian indicativos de un SCLM poco profundo. Se piensa que entre el Alto de Caapucú y Rio de La Plata se habría posicionado un cinturón móvil que se habría formado, por la colisión entre ambas comentadas masas, entre el 1800 a 500 Ma. atrás. El flanco E-SE de

este belt coincide con bastante aproximación con los límites de la Cuenca del Paraná. La configuración de valores LAB dados en las Figs. 10 a 15 pondrían en duda la frecuente idea de que en Alto de Caapucú sea el W del cratón Rio de La Plata.

CONCLUSIÓN

Perfiles 1D-Vs y su derivado perfil de perturbación de la velocidad media $(V_{sv} + V_{sh})/2$ con respecto al modelo global 1D AK135, permiten inferir en 210 puntuales LAB en/bajo a la Cuenca del Paraná y alrededores. Al contar con un número espaciado de puntos donde se definieron LAB superiores a $>193,5$ (=profundidad LAB que denotaría edades >2500 Ma., estimado a partir de $z=0.04*t+93.6$), se trazo un arreglo cratónico (=Archon). Una configuración adecuada se obtuvo al combinar los datos de LAB obtenidos junto con la tomografía sísmica Vs -selectos datos de flujo de calor superficial; la actividad sísmica registrada en ese entorno; en combinación a las informaciones gravimétricas y magnetométricas (en escala regional). Trazado que delineo un gigante dominio

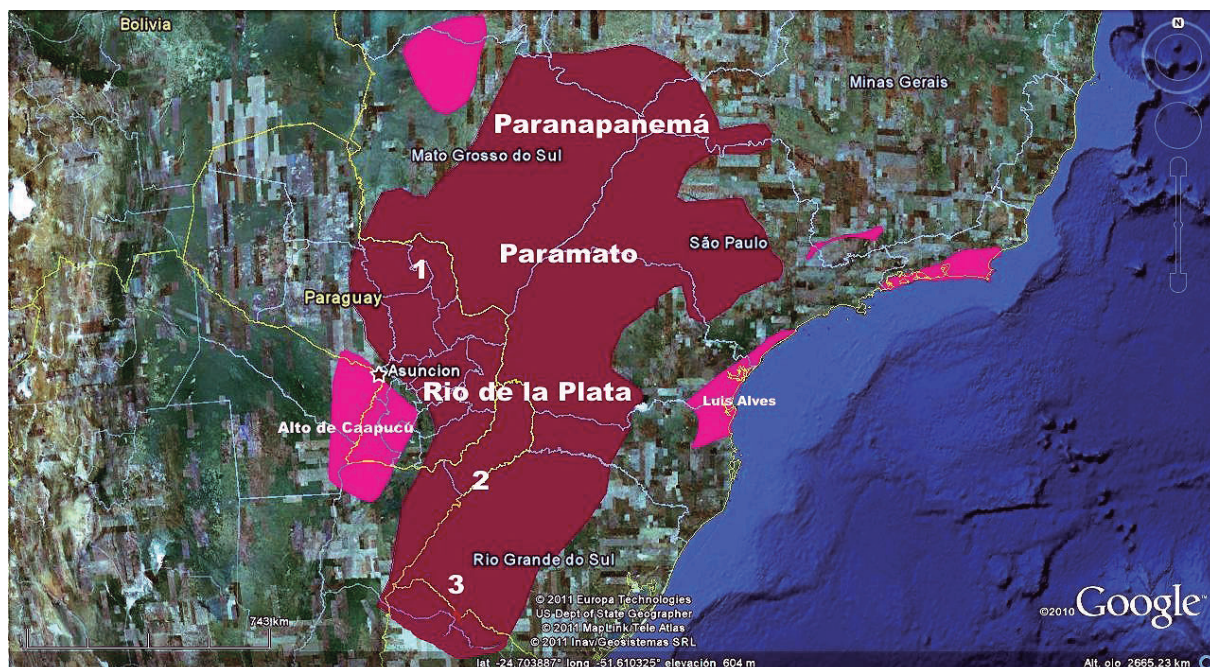


Fig. 17. La Configuración estimada del cratón (sombreado oscuro), junto a la Cuenca del Paraná y sus potestades Archon: Rio de la Plata, Paramato y Paranapanemá. El Archon Rio de la plata, se sub dividió aun en 3 dominios: Rio Apá (1), Rio Paraná (2) y Rio Uruguay (3).

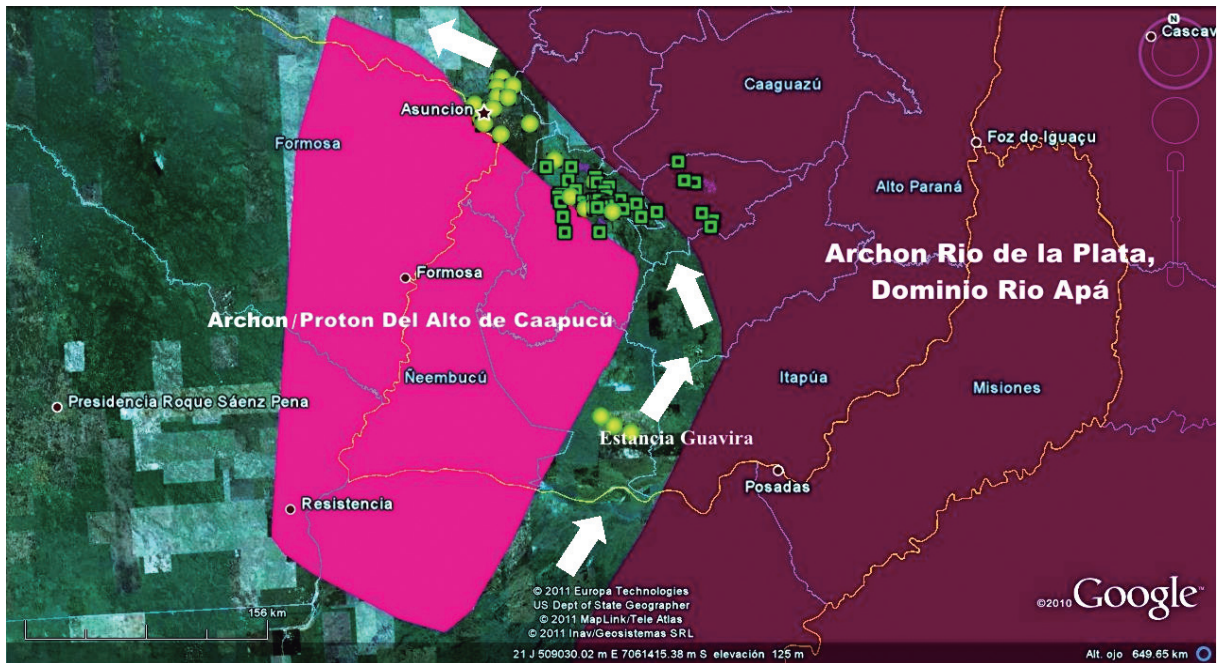


Fig. 18. El Alto de Caapucú. El fragmento del basamento expuesto en la región de Asunción (Paraguay) que corrientemente es visto como la porción W del cratón Rio de La Plata, de acuerdo a la configuración de 1D-Vs o $(V_{sv}+V_{sh})/2$ y los datos aportados por la geología (ver en el texto el ítem III) y la tomografía sísmica (Fig.-15), se piensa que el podría tratarse de un pequeño bloque cratónico/micro-placa Arqueozoico/Paleoproterozoico (aparentemente de 300 Km X 250 Km, Fig.-10 a 13, 15, 17). Al bloque Archon Rio de la Plata de este Alto de Caapucú los separaría una aparente delgada faja donde se ubica el rift de Asunción; este un belt (indicado por las flechas) donde se concentra marcadamente el magmatismo alcalino Mesozoico a Cenozoico (indicado por los cuadrados pequeños). La presencia de nefelinitas Mesozoicas en el perímetro E (por ejemplo en Estancia Guavira) y de numerosas nefelinitas/fonolitas (extremadamente alcalinas) Cenozoicas en el perímetro NNW (Asunción y alrededores) (indicadas por los círculos llenos) serian indicativos de un SCLM poco profundo.

cratónico de ~1610 X 835 Km (en sus bordes de mayor largo y ancho) con forma irregular y algo alargada en dirección NNE-SSW que se extiende entre Paraguay-Brasil-Argentina-Uruguay. Influencia tectónica Archon al que se entendió como siendo el Cratón Rio de la Plata. Ver ítem IV

En la configuración del Archon Rio de la Plata se asignaron sub aéreas o dominios: Rio Apa, Rio Paraná y Rio Uruguay. El Dominio Rio Apa englobaría, parcialmente, las exposiciones del Alto de Rio Apa donde trabajos publicados mostraron edades U-Pb del Proterozoico Inferior y que muestran edad TDM del Arqueozoico; siendo que existen dos registros de edad U-Pb en zircons (1 xenocrystal y 1 cristal incorporado en sedimento diamictítico) de entre 3000 a 3028 Ma. =Terreno Archon en sus bordes encajados/soldados por fajas Proton y Tecton (ítem III). El Dominio Rio

Apa muestra en profundidad una bien definida, en términos de Vs y Ps, blue-zone (150 a >250 Km) como sistemáticamente reconocido por debajo de los grandes cratones Arqueozoicos tal a Kaapvaal, Slave, Yakutia, entre otros. Los primeros estudios sobre los diamantes de Capiibary/Paraguay, (en/ junto a la inferida configuración cratónica del Archon Rio de la Plata, Dominio Rio Apa; área con su basamento que se encuentra sepultado por los sedimentos de la Cuenca de Paraná), permitieron derivar un tiempo de residencia de 3.1 Ga. (3100 Ma.) en su matriz; un aposento de manto peridotítico (hazburgítico o lherzolítico) depletado (tipo de manto también sugerido por la interpretación Vp). Deducido del tiempo de residencia en el manto de 3100 Ma. de los diamantes de Capiibary se concluye que su entorno cratónico tendría un espesor de LAB de ~218-223 Km y por lo mismo

próximo a los valores estimados para esta región con base a 1D-Vs y $(V_{sv}+V_{sh})/2$; i.e. ~ 195 -223 Km = ~ 3100 -2510 Ma.? (Ítem IV).

Los datos comentados más arriba para el Archon Rio de la Plata, en su Dominio Rio Apa junto al Paraguay, se harían extensivos y validos para los Dominios Rio Paraná (~ 195 -201 Km = ~ 2900 -2600 Ma.) y Rio Uruguay (~ 196 -213 Km = ~ 2700 -2510 Ma.), considerando el conjunto de informaciones geofísicas comentadas en el ítem IV. Por lo mismo apuntado, también extensiva para los Archones Paramato (~ 195 -222 Km = ~ 3050 -2510 Ma.) y Paranapanema (~ 195 -240 Km = ~ 3500 -2510 Ma.); siendo que ambos se desconocen exposiciones del basamento por estar cubiertos por sedimentos de la Cuenca del Paraná.

Se interpreta que el manto litosférico subcontinental (SCLM) por debajo de terrenos Archons (de 145-150 a 300 Km) y por debajo de los terrenos (Paleo) Protons (de 145-150 a <195 Km), junto a la Cuenca del Paraná y alrededores, se constituyen en las “ventanas del diamante”. Sin embargo los Archones, en la Cuenca del Paraná y alrededores, por su mayor espesor serían mucho más atractivos que los Protones para posicionar minas de diamante de clase mundial; i.e. Clifford's Rule.

REFERENCIAS

- Almeida, F.F.M. ; Amaral, G. Cordani, U.G. & Kawashita, K. 1973. The Precambrian evolution of the South America cratonic margin south of the Amazon river. In: NAIR & STEHLI (eds), The ocean basins and Plenum, 1: 411-446.
- Artemieva, I.M., (2006). Global $1^\circ \times 1^\circ$ thermal model TC1 for the continental lithosphere: Implications for lithosphere secular evolution Tectonophysics, 416, 245-277.
- Babinski, M.; Boggiani, P. C.; Trindade, R.I.F. & Fanning, C. M., (2008). U-Pb SHRIMP ages on detrital zircons from glaciogenic diamictites of the Puga Formation, Southern Paraguay Belt, Brazil. 33rd International Geological Congress, AMS-07 Crustal evolution of the cratonic nuclei of South America: Oslo, CD-ROM.
- Basei, M.A.S., (1985). O cinturao Dom Feliciano em Santa Catarina. Sao Paulo, 195p. Tese de Doutorado, IGc - USP.
- Basei, M.A.S.; Siga Júnior, O.; Machiavelli, A. & Mancini, F., (1992). Evolução tectônica dos terrenos entre os Cinturões Ribeira e Dom Feliciano (PR - SC). Rev. Bras. Geoc., 22 (2): 216-221.
- Basei, M.A.S.; Siga Jr., O.; Reis Neto, J.M.; Harara, O.M.; Passarelli, C.R. & Machiavelli, A., (1997). Geochronological map of the Precambrian terrains of Paraná and Santa Catarina States, southern Brazil: Tectonic implications. In: South-Amer. Simp. on Isot. Geol., Extend. Abstr., 44-46. Brazil.
- Bitschene, P.R., (1987). Mesozoischer und Känozoischer anorogener Magmatismus in Ostparaguay: arbeiten zur geologie und petrologie zweier Alkaliprovinsen. Ph.D Dissertation, Heidelberg University, 317 p. (no publicado).
- Bitschene, P.R. & Presser, J.L.B., (1989). The Asunción Alkaline Province (Eastern Paraguay): Geologic Setting and Petrogenetic Aspects. Zbl. Geol. Palaont., Teil 5/6: 959-971.
- Bizzi, L.B.; Schobbenhaus, C.; Vidotti, R. M. & Gonçalves, J. H. (eds.), (2003). Geologia, Tectônica e Recursos Minerais do Brasil. 5 CPRM, Brasília.
- Bowring, S. A., (1999). Priscoan (4.00-4.03 Ga) orthogneisses from northwestern Canada. Mineralogy and Petrology, Volume 134, Issue 1, pp. 3-16.
- Brito-Neves, B. B. (1995). Crátons e faixas móveis. Bol. IG-USP, Sér. Didát. Sao Paulo, SP., 7: 1-87
- Brito-Neves, B.B. & Cordani, U., (1991). Tectonic evolution of South America during the Late Proterozoic. Precam. Research., 53: 23-40.
- Brito-Neves, B. B.; Winge, M. & Carneiro, M.A., (1996). Orogeneses precedendo e tafrogeneses sucedendo Rodímia na América do Sul. Bol. IG-USP, Sér. Cient. 27: 1-40.

- Chemale Jr., F.; Babinski, M.; Van Schmus, W.R.; Wildner, W. & Lima, E.F., (1997). U-Pb and Sm-Nd isotopic studies of Neoproterozoic to early Paleozoic belts in southern Brazil. In: South-Amer. Simp. on Iso1. Geol., Extend. Abstr., Brazil.
- Chen, L. & Zhang, H., (2011). International Conference on Craton Formation and Destruction. Beijing, China. Abril 25-29 del 2011. Abstract, 200 p.
- Clifford, T.N., (1966). Tecto-metallogenetic units and metallogenetic provinces of Africa. *Earth Planet. Sci. Lett.* 1, 421-434.
- Cingolani, C.; Varela, R.; Dalla Salda, L. Bossi, J.; Campal, N.; Ferrando, L. Pineyro, D. & Schipilov, A., (1997). Rb-Sr geochronology from the Rio de La Plata craton of Uruguay. In: South-Amer. Simp. on Iso1. Geol., Extend. Abstr., Brazil.
- Comin-Chiaramonti, P., Cundari, A., Piccirillo, E.M., Gomes, C.B., Castorina, F., Censi, P., Demin, A., Marzoli, A., Speziale, S. & Velázquez, V.F., (1997). Potassic and sodic igneous rocks from Eastern Paraguay: their origin from the lithospheric mantle and genetic relationships with the associated Paraná flood tholeiites. *Journal of Petrology* 38, 495-528.
- Comin-Chiaramonti, P., & Gomes, C.B., (1995). Alkaline magmatism in Central-Eastern Paraguay, relationships with coeval magmatism in Brazil. São Paulo, Edusp/Fapesp, 464pp.
- Cordani, U.G., Brito Neves, B.B., Fuck, R.A., Porto, R., Thomaz Filho, A. & Cunha, F.M.B., (1984). Estudo preliminar de integração do Precambriano com os eventos tectônicos das bacias sedimentares brasileiras. – *Bol. Técnico CENPES – Petrobrás* 70p.
- Cordani, U. G.; Cubas, N.; Sato, K.; Nutman, A. P.; Gonzales, M. E. & Presser, J. L. B., (2001). Geochronological constraints for the evolution of the metamorphic complex near the Tebicuary River, Southern Precambrian Region of Paraguay. In: III SSAGI, 2001, Pucon - Chile. III Simposio Sudamericano de Geología Isotópica, 2001.
- Cordani, U.G.; Tassinari, C.C.G. & Reis Rolim, D., (2005). The Basement of the Rio Apa Craton in Mato Grosso do Sul (Brazil) and Northern Paraguay: a geochronological correlation with the tectonic provinces of the south-western Amazonian Craton. *Proceedings of the 12th Gondwana Conference, Abstracts, Mendoza, p. 113.*
- Cordani, U. G., Tassinari, C. C. G., Teixeira, W. & Coutinho, J. M. V., (2008), The basement of the Rio Apa Craton in Mato Grosso do Sul (Brazil) and northern Paraguay: Tectonic implications and correlations, 33rd International Geological Congress, AMS-07 Crustal evolution of the cratonic nuclei of South America: Oslo, CD-ROM.
- Cubas, N., Garcete, A., Meinhold, K.D., Benitez, J.C., Figueredo, L., Gonzales, M.E., Burgahat, K.P. & Höndorf, A., (1997). Mapa Geológico de la República del Paraguay – Escala 1 : 100 000, Hoja Villa Florida. MOCP, Asunción, 71p.
- Dalla Salda, L.; Bossi, J. & Cingolani, C., (1988). The Rio de La Plata cratonic region of Southwestern Gondwanaland. *Episodes*, 11 (4): 263-269.
- Darbyshire, F. & Eaton, D.W., (2010). The lithospheric root beneath Hudson Bay, Canada from Rayleigh wave dispersion: No clear seismological distinction between Archean and Proterozoic mantle. *Lithos* 120, 144–159.
- DeGraff, J.M., (1985). Late Mesozoic crustal extension and rifting on the western edge of the Paraná Basin, Paraguay. *Geological Society of America, Abstracts with Programs* 17, p. 560.
- DeGraff, J.M. & Orué, D., (1984). Proyecto tectónico del Paraguay Suroriental: informe de progreso al termino del trabajo de campo (2da. etapa). Asunción: MDN-DIM, Relatário Interno, 12p.
- DeMarchi G., Comin-Chiaramonti P. De Vito P.,

- Sinigoi S. & Castillo A.M.C., (1988). Lherzolite-dunite xenoliths from Eastern Paraguay: petrological constraints to mantle metasomatism. In: Piccirillo E.M. & Melfi A.J. (Eds.) *The Mesozoic Flood Volcanism from the Paraná Basin (Brazil). Petrogenetic and geophysical aspects.* Iag-Usp, São Paulo, Brazil (1988), 207-227.
- Eaton, D.W., Darbyshire, F., Evans, R.L., Grütter, H., Jones, A.G., & Yuan, X., (2009). The elusive lithosphere–asthenosphere boundary (LAB) beneath cratons. *Lithos* 109, 1–22.
- Echeveste, H.; Ribot, A.; Texeira, W.; Fernández, R.; Girardi, V.A.V.; Piccirillo, E.M.; Bellieni, G. & Jacumin, (1997). Preliminary Rb/Sr geochronology of calc-alkaline dykes from the Tandilia system, Buenos Aires Province, Argentina. In: *South-Amer. Simp. on Isot. Geol., Extend. Abstr.*, 107109. Brazil.
- Engler, T., (1991). *Petrographische und geochronologische Arbeiten in Ostteil des Rio Tebicuary-Kratons in Südöst Paraguay.* Diplom. Diss., Univ. Heidelberg, 154p.
- Escalante, C., (2002) *Tomografia sísmica do manto superior sob o Sudeste e Centro Oeste do Brasil.* Dissert. de Mestrado, IAG/USP, São Paulo, Brasil.
- Fishwick, S., (2010). Surface wave tomography: Imaging of the lithosphere–asthenosphere boundary beneath central and southern Africa?. *Lithos* 120, 63–73.
- Fragoso-Cesar, A.R.S.F. & Sollani, E., (1984). Compartimentação tectônica do cráton Rio de La Plata. *Anais XXXIII Congr. Brasil. Geol. Rio de Janeiro, Brasil*, 5: 2426-2434.
- Fragoso-Cesar, A.R.S. & Machado, R., (1997). Neoproterozoic terranes of the Gaúcho shield (Southern Brazil and Uruguay). In: *South-Amer. Simp. on Isot. Geol., Extend. Abstr.*, 65-67. Brazil.
- Godoy, A. M.; Manzano, J. C.; Araújo L. M. B. de & Silva, J. A. da (2009). Contexto Geológico E Estrutural Do Maciço Rio Apa, Sul Do Cráton Amazônico – M São Paulo, UNESP, Geociências, v. 28, n. 4, p. 485-499, 2009
- Guimaraes, G.B., (1995). Ocomplexo granítico Cunhaporanga na região de Joaquim Murinho, Pirai do Sul (Pr): Caracterização Faciológica das rochas granitoides. Diss. Mestrado. IGc/USP 144p.
- Gurney, J.J. & Zweistra, P., (1995). The interpretation of the major element compositions of the mantle minerals in diamond exploration. *J. of Geoche. Exploration*, 53: 293-309.
- Hallinan, S.E.; Mantovani, M.S.M.; Shukowsky, W. & Braggion, L. Jr. (1993). Estrutura do Escudo Sul-Brasileiro: uma revisão através de dados gravimétricos e magnetométricos. *Rev. Brasil. Geoc.*, 23 (3): 201-214.
- Harara, O.M.; Basei, M.A.S. & Siga Júnior, O., (1997). Geochronological and geochemical date on the transition zone between Luis Alves and Atuba 238 Complexes, south Brazil. In: *South-Amer. Simp. on Isot. Geol., Extend. Abstr.*, 134-136. Brazil.
- Hasui, Y., (2010). A grande colisão pré-cambriana do sudeste Brasileiro e a estruturação regional. São Paulo, UNESP, Geociências, v. 29, n. 2, p. 141-169,
- Heintz, M., Debayle, E. & Vauchez, A., (2005). Upper mantle structure of the South American continent and neighboring oceans from surface wave tomography. *Tectonophysics* 406: 115–139.
- Helmstaedt, H.H & Gurney, J.J., (1995). Geotectonic controls of primary diamond deposits: implications for area selection. *J. of Geochemical Exploration*, 53: 125-144.
- Hutchinson, M., (1979). *Geology of the Apa High.* The Anschutz Co. Informe Interno. Paraguay.
- James, D.E., & Fouch, M.J., (2002). Formation and Evolution of Archaean Cratons: Insights from Southern Africa. In *The Early Earth: Physical, Chemical and Biological Development*, edited by C. Ebinger, C.M.R. Fowler, and C.J. Hawkesworth, pp. 1-26, Geological Society, London.
- James, D.J. & the Kaapvaal Working Group,

- (2011). Formation and Evolution of Cratons: Lessons from Southern Africa. Abstract of International Conference On Craton Formation And Destruction, Beijing China.
- Janse, A.J.A., (1985). Kimberlites -where and when. In: GLOVER & HARRIS (eds), Kimberlite occurrence and origin: Geol. Dep. and Univ. Ext., University of Western Australia Publication, 8:19-61
- Janse, A.J.A., (1994). Is Clifford's rule still valid? Affirmative examples from around the world. In: Meyer, H.O.A., Leonardos, O. (Eds.), Diamonds: Characterization, Genesis and Exploration. Dept. Nacional da Prod. Mineral., Brazilia, pp. 215-235.
- Janse, A.J.A., (1995). A history of diamond sources in Africa: Part I. Gems and Gemology, 228-255.
- Kaminsky, F.V.; Feldman, A.A.; Varlamov, V.A.; Boyko, A.N.; Olofinsky, L.N.; Shofman, I.L. & Vaganov, V.I., (1995). Prognostication of primary diamond deposits. J. of Geochemical Exploration, 53: 167-182.
- Kanzler, A., (1987). The Southern Precambrian in Paraguay – Geological Inventory and Age Relations. – Zbl. Geol.Paläont. Teil I, 7/8 : 753-765.
- Lacerda Filho, J.W.; Brito, R.S.C.; Silva, M.G.; Oliveira, C.C. De, Moreton, L.C., Martins, E.G., Lopes, R.C., Lima, T.M., Larizzatti, J.H. & Valente, C.R., (2006). Geologia e Recursos Minerais do Estado de Mato Grosso do Sul. Programa Integração, Atualização e Difusão de Dados de Geologia do Brasil. Convênio CPRM/SICME - MS, MME, 121 p.
- Lebedev, S.; Boonen, J. & Trampert, J., (2009). Seismic structure of Precambrian lithosphere: New constraints from broad-band surface-wave dispersion. Lithos 109, 96-111.
- Lebedev, S. & Trampert, J., (2010). S-Velocity Structure of Cratons, from Broad-Band Surface-Wave Dispersion IRIS Core Proposal 2010 | Volume II Lithosphere Lithosphere/Athenosphere Boundary | 11-151.
- Lohse, B., (1990). Petrographische und geochronologische Erkenntnisse über den Westteil des Tebicuary-Kratons in Südost Paraguay. Diplom. Diss., Univ. Heidelberg, 103 p.
- Mallmann, G.; Chemale Jr., F.; Armstrong, R. & Kawashita, K., (2003). Sm-Nd and U-Pb Shrimp Zircon Studies Of The Nico Pérez Terrane, Reworked Rio De La Plata Craton, Uruguay. Short Papers – IV South American Symposium on Isotope Geology. p. 207-210.
- Mantovani, M.S.M.; Hawkesworth, C.J. & Baisei, M.A.S., (1987). Nd and Pb isotope studies bearing on the crustal evolution of southeastern Brazil. Rev. Brasil. Geocienc., 17: 263-268.
- Mantovani, M.S.M., Quintas, M.C.L., Shukowsky, W. & de Brito Neves, B.B., (2005). Delimitation of the Paranapanema Proterozoic block: a geophysical contribution, Episodes, 28(1), 18-22.
- Medeiros Delgado, I.; Dalton de Souza, J.; da Silva, L.C.; da Silveira Filho, N.C.; dos Santos, R.A.; Pedreira, A.J.; Torres Guimarães, J.; de Aquino Angelim, L.A.; Vasconcelos, M.A.; Paiva Gomes, I.; de Lacerda Filho, J-V.; Rodrigues Valente, C.; Mazzini Perrotta, M.; & Heineck, C.A., (2003). Geotectônica do Escudo Atlântico Geotectonics of the Atlantic Shield. In: L. A. Bizzi, C. Schobbenhaus, R. M. Vidotti e J. H. Gonçalves (Eds.) Geologia, Tectônica e Recursos Minerais do Brasil CPRM, Brasília, (2003), pp. 227-332.
- Morgan, P., (1995). Diamond exploration from the bottom up: regional geophysical signatures of lithosphere conditions favorable for diamond exploration. J. of Geochemical Exploration, 53: 145-165.
- O'Reilly, S.Y. & Griffin, W.L., (2010). The continental lithosphere–asthenosphere boundary: Can we sample it?. Lithos 120, 1-13.
- Presser, J.L.B., (1992). Geologia da Folha 5569-111 La Colmena, Paraguai Oriental. Sao Paulo, 205p. Diss. de Mestrado, IG-USP.

- Presser, J.L.B., (1998). Feicoes Mineralógicas de rochas lamprofíricas Mesozoicas da Província Alcalina Central, Paraguai Oriental. Sao Paulo, 355p, Tese de Doutorado, IG-USP. Sao Paulo-Brasil,
- Presser, J.L.B., (2005). Diamantes junto al Complejo del Rio Apa (Bloque cratónico Rio Apa), Dpto. de Concepción (Paraguay) frontera con el estado de Mato Grosso do Sul (Brasil). IV Simposio Brasileiro de Geologia do Diamante, II South American Symposium on Diamond Geology.
- Presser, J.L.B., (2005). Perspectivas en relación al diamante en el Paraguay Oriental. IV Simposio Brasileiro de Geologia do Diamante, II South American Symposium on Diamond Geology.
- Presser, J.L.B., (2008). Looking for diamond-bearing kimberlites to make world class diamond mines from South America: the Rio Apa Cratonic Block. IV Simposio de Vulcanismo e Ambientes Associados. Foz do Iguaçu – PR, 2008.
- Presser, J.L.B., (2010a). Trazado del límite litosfera-astenosfera bajo Cratones a partir de datos S-wave en perfiles 1D. Simpósio Brasileiro de Geologia do Diamante (5. : 2010 : Tibagi, PR) Anais/ V Simpósio Brasileiro de Geologia do Diamante. – Curitiba: Tibagi: Sociedade Brasileira de Geologia, Núcleo – PR, 2010. 101 p. : il., tabs. p-82.
- Presser, J.L.B., (2010b). Blancos para fuentes primarias de diamantes con potencial económico entre Paraguay, Brasil, Argentina y Uruguay (región de la Cuenca del Paraná). Simpósio Brasileiro de Geologia do Diamante (5. : 2010 : Tibagi, PR) Anais/ V Simpósio Brasileiro de Geologia do Diamante. – Curitiba: Tibagi: Sociedade Brasileira de Geologia, Núcleo – PR, 2010. 101 p. : il., tabs. p-83.
- Presser, J.L.B., (2010c). Paraguay Un Pais Con Diamantes. Boletín del Museo Nacional de Historia Natural del Paraguay, n-17-(2010)-en edición.
- Presser, J.L.B., (2010d). Trazado del límite litosfera-astenosfera bajo Cratones a partir de datos S-wave en perfiles 1D. Bmnhnpy, n-17-(2010)-en edición.
- Presser, J.L.B., (2010e). Blancos para fuentes primarias de diamantes con potencial económico entre Paraguay, Brasil, Argentina y Uruguay (región de la Cuenca del Paraná). Bmnhnpy, n-17-(2010)-en edición.
- Priestley, K. & Debayle, E., (2003). Seismic evidence for a moderately thick lithosphere beneath the Siberian Platform. GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS, VOL. 30, NO. 3, 11-18.
- Proyecto PAR 83/005, (1986). Mapa Geológico del Paraguay (1 mapa 1: e texto explicativo). Realizagao por Palmieri & Fúlfaro, Asunción Paraguay. Gov. Rep. del Paraguay/ONU.
- Quintas, M. C. L., (1995). O embasamento da Bacia do Paraná: reconstrução geofísica de seu arcabouço. São Paulo: USP. Instituto Astronômico e Geofísico, 1995. 213 p. Tese (Doutorado).
- Ramos, V. A.; Vujovitch, G.; Martinob, R. & Otamendic, J., (2010) Pampia: A large cratonic block missing in the Rodinia supercontinent. Journal of Geodynamics 50 243–255
- Rocha, M. P., (2003) Ampliação da Tomografia Sísmica do Manto Superior no Sudeste e Centro-Oeste do Brasil com ondas P. Dissert. de Mestrado, IAG/USP, São Paulo, Brasil.
- Rocha, M.P., (2008). Tomografia sísmica com ondas P e S para o estudo do manto superior no Brasil. Tesis, IAG-USP, Sao Paulo-Brasil.
- Rocha, M.P.; Schimmel, M. & Assumpção M., (2011). Upper-mantle seismic structure beneath SE and Central Brazil from P- and S-wave regional traveltimes tomography. Geophys. J. Int. 184, 268–286
- Sato, K., (1998). Evolução Crustal Da Plataforma Sul Americana, Com Base Na Geoquímica

- Isotópica Sm-Nd. São Paulo: USP. Instituto de Geociencias. 321 p. Tese (Doutorado).
- Schimmel, M.; Assumpcao, M. & VanDecar, J., (2003). Upper mantle seismic velocity structure beneath SE Brazil from P- and S_w-wave travel time inversions, *J. geophys. Res.*, 108(B4), 2191.
- Schobbenhaus, C. & Bley de Brito Neves B., (2003). A Geologia do Brasil no Contexto da Plataforma Sul-Americana *Geology of Brazil in the Context of the South American Platform*. In *Geologia, Tectônica e Recursos Minerais do Brasil* L. A. Bizzi, C. Schobbenhaus, R. M. Vidotti e J. H. Gonçalves (eds.) CPRM, Brasília, 2003. pp. 5-54
- Schobbenhaus, C.; Campos, D.A.; Derze, G.R. & Asmus, H.E., (1984). *Geologia do Brasil. Texto explicativo do mapa geológico do Brasil e da area oceanica adjacente incluindo depósitos minerais*. Dep. Nac. Prod. Mineral (DNPM), Brasilia, 501 p.
- Siga Junior., O.; Basei, M.A.S.; Reis Neto, J.M.; Harara, O.M.; Passarelli, C.R.; Prazeres, H.; Weber, W. & Machiavelli, A., (1997). Ages and tectonic setting of alkaline-peralkaline granitoids of Paraná and Santa Catarina States, southern Brazil. In: *South-Amer. Simp. on Isot. Geol., Extend. Abstr.*, 301-303. Brazil.
- Smith C.B.; Bulanova, G.P. & Presser, J.L.B., (2012) *Diamonds From Capiibary, Paraguay*. 10th International Kimberlite Conference Extended Abstract No. 10IKC-36
- Snyder, D.B.; Rondenay, S.; Bostock, M.G. & Lockhardt, G.D., (2004). Mapping the mantle lithosphere for diamond potential using teleseismic method. *Lithos* 77, 859–872.
- Sollani Jr, E., (1986). Os dados geocronológicos do escudo Sul-Rio-Grandense e suas implicações de ordem geotectônica. São Paulo 396 p. Tese de Doutorado. IGc - USP.
- Swicero, D.P., (1994). Distribution and origin of diamond in Brazil: an overview. In: *International Symposium on the physics and chemistry of the Upper Mantle (ISUM)*. São Paulo, CPRM/FAPESP. p. 257-287.
- Tassinari, C.C.G., (1996). O mapa geocronológico do cráton Amazonico no Brasil: Revisão dos dados isotópicos. São Paulo, 248p. Tese de Livre-Docente, IGc. USP.
- Teixeira, W., (1992). Contribuição ao conhecimento geocronológico do cráton do São Francisco: Avaliação de dados isotópicos em rochas ígneas e metamórficas Implicações na evolução crustal Pré-Cambriana. São Paulo, 172p. Tese de Livre-Docente, IGc - USP.
- Trompette, R., (1994). *Geology of Western Gondwana 2.000-500 Ma. The PanAfrican Brazilian Amalgamation of South America and Adjacent Africa*. Rotterdam, Balkema. 366p.
- VanDecar, J.; James, D. & Assumpção, M., (1995) Seismic evidence for a fossil mantle plume beneath South America and implications for plate driving forces. *Nature*, 378, 25-31.
- White, S.H.; de Boer, H. & Smith, C.B., (1995). Structural controls of kimberlite and lamproite emplacement. *J. of Geochemical Exploration*, 53: 245-264.
- Wiens, F., (1986). Zur lithostratigraphischen und strukturellen entwickung des Rio Apa Hochlandes, Nordost Paraguay. Ph.D. Thesis, Clausthal University, 280p.
- Wilde S.A., Valley J.W., Peck, W.H. & Graham, C.M., (2001). Evidence from detrital zircons for the existence of continental crust and oceans on the Earth 4.4 Gyr ago. *Nature*, v. 409, 175-178.
- Xu, W.; Lithgow-Bertelloni, C; Stixrude, L. & Ritsema, J., (2008). The effect of bulk composition and temperature on mantle seismic structure. *Earth and Planetary Science Letters* 275, 70–79.

NUEVA LOCALIDAD PARA *LEPTODEIRA ANNULATA* (SERPENTES: DIPSADIDAE) EN LA REGIÓN ORIENTAL DE PARAGUAY, Y DATOS SOBRE SU DISTRIBUCIÓN**NEW LOCALITY RECORD FOR *LEPTODEIRA ANNULATA* (SERPENTES: DIPSADIDAE) IN ORIENTAL REGION OF PARAGUAY AND DATA ABOUT ITS DISTRIBUTION**PIER CACCIALI¹

¹Instituto de Investigación Biológica del Paraguay, del Escudo 1607, Asunción, Paraguay; y Asociación Guyra Paraguay, Gaetano Martino 215, Asunción, Paraguay. E-mail: pier_cacciali@yahoo.com.

Leptodeira annulata es una culebra de hábitos terrestres aunque generalmente trepa árboles y arbustos, y se alimenta básicamente de ranas y lagartijas (Norman, 1994; Scrocchi et al., 2006). Se distribuye desde México, a través de la cuenca amazónica hasta Paraguay y el norte de Argentina (Peters y Orejas-Miranda, 1970; Tipton, 2005). A lo largo de su distribución, cinco subespecies pueden ser reconocidas, de las cuales *L. a. pulchriceps* es la única registrada para Paraguay.

En Paraguay fue citada en reiteradas ocasiones (Boettger, 1885; Boulenger, 1894; Schouten, 1931; Bertoni, 1939; Gatti, 1955; Talbot, 1979) aunque el primer registro concreto y fidedigno sobre su distribución fue realizado por Giraudo y Contreras (1994) quienes la citan para el Departamento de Ñeembucú. Luego de eso, fue registrada por Aquino et al. (1996) también para Ñeembucú y para los tres Departamentos de la Región Occidental (Alto Paraguay, Boquerón y Presidente Hayes) en los que la especie resulta bastante común. Además, citaron un ejemplar procedente del Parque Nacional Cerro Corá, ubicado en el Departamento de Amambay (Aquino et al., 1996) aunque no existen ejemplares de dicha procedencia en la colección del Museo Nacional de Historia Natural del Paraguay [MNHNP]. Finalmente Ziegler et al. (2002) la registraron para distintos sitios en la Región Occidental del país.

Paraguay cuenta biogeográficamente con cinco ecorregiones según Dinerstein et al. (1995): Cerrado, Bosque Atlántico del Alto Paraná, Pantanal, Chaco Húmedo y Chaco Seco (Figura 1). Los registros previamente conocidos de esta especie en

Paraguay, corresponden al Chaco Seco y al Chaco Húmedo.

En esta comunicación se da a conocer la presencia de *L. annulata* en Estancia Estrella, Departamento Concepción (22°10'S; 57°31'W) la cual constituye una nueva localidad para la especie en Paraguay. La ocurrencia de esta especie en dicha localidad constituye un dato novedoso ya que se extiende más de 550 Km al norte de la localidad previamente conocida de la Región Oriental en un área de Chaco Húmedo. En la Figura 2 se muestra la distribución conocida de *L. annulata* en Paraguay, y la nueva localidad para la especie en el país.

El territorio paraguayo es un complejo sistema biogeográfico en el que convergen varias áreas naturales (Spichiger et al. 1995). El área de Estrella (localidad nueva mencionada en esta comunicación) se encuentra en una zona de Cerrado, con componentes transicionales del Chaco Húmedo.

Según la literatura, esta especie habita principalmente zonas chaqueñas (Giraudo, 2001), y en Paraguay se la encuentra asociada por lo general al Chaco Seco y otros ambientes xéricos (Norman, 1994). Con respecto a la presencia de esta especie en el Cerrado, puede ser posible, ya que se la encuentra en el Cerrado brasileño (Colli et al., 2002). Sin embargo su presencia en el Cerrado de Paraguay aun debe ser confirmada.

AGRADECIMIENTOS

Un agradecimiento muy especial a Ana María Macedo (Natural Landtrust Paraguay) y José L. Cartes (Asociación Guyra Paraguay) por el apo-

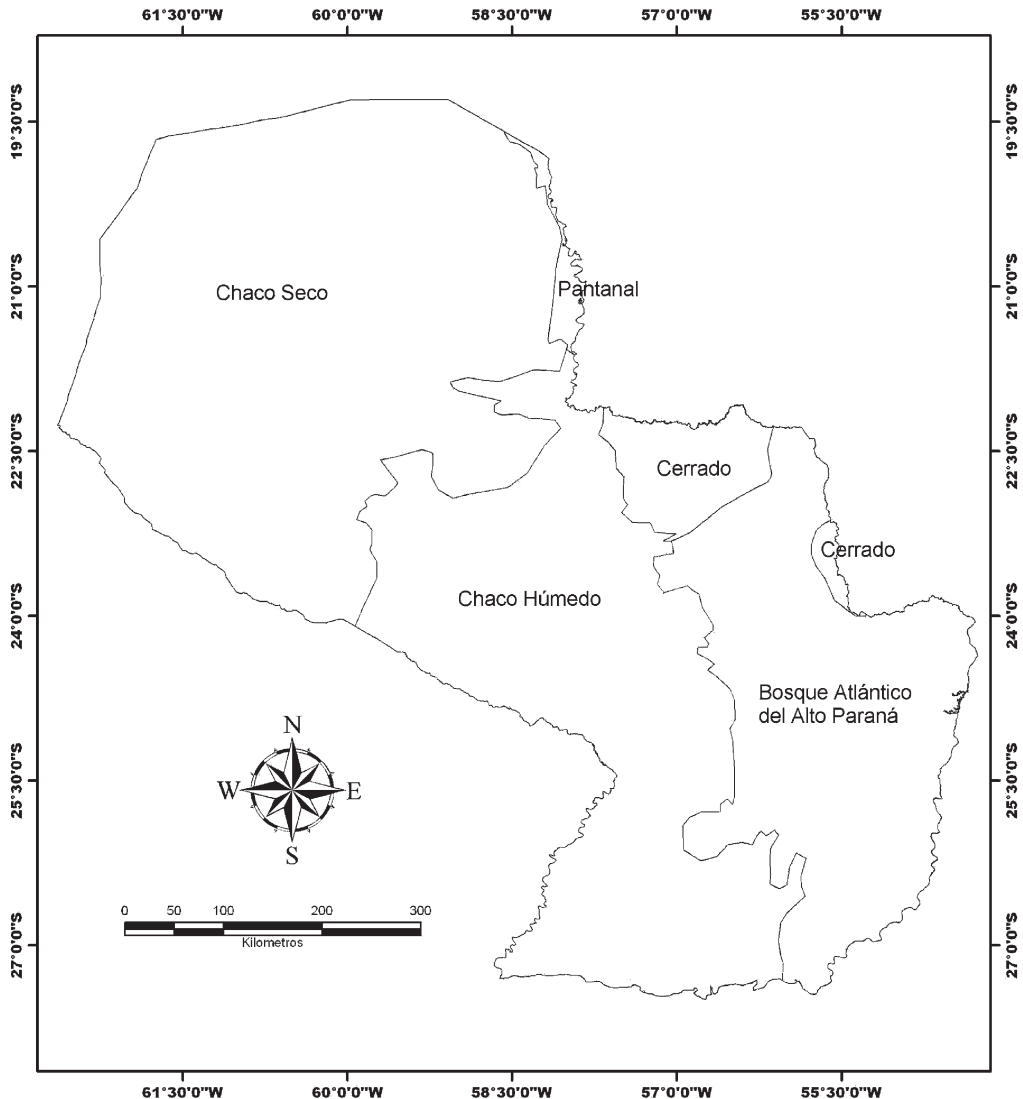


Figura 1. Ecorregiones de Paraguay.

yo para durante este trabajo. Además a Hugo del Castillo, Gloria Céspedes, Leticia Céspedes y Marianela Velilla por su colaboración y camaradería durante las actividades de campo. Esta observación se realizó dentro del marco del proyecto Justificativa Técnica para la Reserva Privada Estrella. También un agradecimiento a Martha Motte (Museo Nacional de Historia Natural del Paraguay) por permitir la revisión de los ejemplares a su cargo. La revisión del material del MNHNP, se realizó en el marco del proyecto de tesis “Biogeografía de Reptiles de Paraguay” llevado a cabo por el autor.

REFERENCIAS

- AQUINO, A.L.; SCOTT, N.; MOTTE, M. 1996. Lista de los anfibios y reptiles del Museo Nacional de Historia Natural del Paraguay. In: ROMERO, O. Colecciones de Fauna y Flora del Museo Nacional de Historia Natural del Paraguay. Ministerio de Agricultura y Ganadería. Asunción. p. 331-400.
- BERTONI, A. DE W. 1939. Catálogos sistemáticos de los vertebrados de Paraguay. Revista de la Sociedad Científica del Paraguay, 4:3-60.
- BOETTGER, O. 1885. Liste von Reptilien und



Figura 2. Localidades de presencia de *Leptodeira annulata* en Paraguay. Círculos negros: localidades previamente conocidas y confirmadas con ejemplares de referencia. Círculo blanco: localidad referida en bibliografía. Rombo: nueva localidad mencionada en la presente contribución.

- Batrachiern aus Paraguay. Zeitschrift für Naturwiss, 58:213-248.
- BOULENGER, G. A. 1894. List of Reptiles and Batrachians collected by Dr. J. Bohls near Asuncion, Paraguay. Annals & Magazine of Natural History, 13:342-348.
- COLLI, G.R.; BASTOS, R.P.; ARAUJO, A.F.B. 2002. The Character and Dynamics of the Cerrado Herpetofauna. In: OLIVEIRA, P.S.; MARQUIS, R.J. The Cerrados of Brazil: Ecology and Natural History of a Neotropical Savana. Columbia University Press. New York. p. 223-241
- DINERSTEIN, E.; OLSON, D.; GRAHAM, D. et al. 1995. Una evaluación del estado de conservación de las ecorregiones terrestres de América Latina y el Caribe. WWF, Banco Mundial. Washigton, D.C. 135 pp.
- GATTI, C. 1955. Las culebras venenosas del Paraguay. Revista Médica del Paraguay, 1:81-100.
- GIRAUDO, A. 2001. Serpientes de la Selva Paranaense y del Chaco Húmedo. Literature of Latin América. Buenos Aires. 285 pp.
- GIRAUDO, A.; CONTRERAS, A.O. 1994. Lista preliminar de los reptiles registrados en

- el Departamento de Ñeembucú, Paraguay. Boletín de la Asociación Herpetológica Argentina, 10:1-4.
- NORMAN, D. 1994. Anfibios y Reptiles del Chaco Paraguayo, Tomo I. San José. Costa Rica. 309 pp.
- SCHOUTEN, G. 1931. Contribuciones al conocimiento de la fauna herpetológica del Paraguay y de los países limítrofes. Revista de la Sociedad Científica del Paraguay, 3:5-32.
- SCROCCHI, G.; MORETA, J.C.; KRETZSCHMAR, S. 2006. Serpientes del Noroeste Argentino. Fundación Miguel Lillo. Tucumán. 45 pp.
- SPICHTER, R.; PALESE, R.; CHAUTEMS, A. et al. 1995. Origin, affinities and diversity hot spots of the Paraguayan dendrofloras. Candollea, 50:515: 537.
- TALBOT, J.J. 1979. Una nueva lista sistemática de reptiles del Paraguay. Informes Científicos del Instituto de Ciencias Básicas, 2:76-94.
- TIPTON, B. 2005. Snakes of the Americas, checklist and lexicon. Krieger Publishing Company. Florida. 492 pp.
- ZIEGLER, T.; UNGER, J.; FEILER, A. et al. 2002. The first Gran Chaco Expedition of the Museum für Tierkunde Dresden: Records of amphibians, reptiles and mammals from the Dry Chaco of Paraguay (Amphibia, Reptilia, Mammalia). Faunistische Abhandlungen Staatliches Museum für Tierkunde Dresden, 23:219-238.

APÉNDICE

Material Examinado

PARAGUAY (MNHNP 9249, 9253, 9260). **DEPARTAMENTO ALTO PARAGUAY**: Estancia General Díaz (MNHNP 3396); Fortín Madrejón (MNHNP 2513-5, 3592, 3595, 3776, 5213). **DEPARTAMENTO BOQUERÓN**: 36 km S de Fildelfia (MNHNP 9733); alrededores de Virgen del Rosario (MNHNP 10769); Estancia La Gama (MNHNP 4138-9); Estancia Mbutú Retã (MNHNP 3392); Parque Trébol (MNHNP 5212). **DEPARTAMENTO ÑEEMBUCÚ**: Estancia Yacaré (MNHNP 6690). **DEPARTAMENTO CONCEPCIÓN**: Estancia Estrella (IIBP 662). **DEPARTAMENTO PRESIDENTE HAYES**: Estancia La Victoria (MNHNP 2511-2); Estancia Loma Porã (MNHNP 9182, 9200); Rancho Carandá (MNHNP 5190); camino a General Díaz, 49 km W de Ruta IX (MNHNP 5211).

GUÍA PARA LA PRESENTACIÓN DE ARTICULOS CIENTÍFICOS EN LA REVISTA “REPORTES CIENTIFICOS DE LA FACEN”

Guía basada en los requisitos de publicación del Council of Science Editors (CSE)

Reportes Científicos de la FACEN es la revista científica de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Asunción, que publica trabajos científicos en las áreas de Biología, Química, Física, Matemáticas Pura, Matemática Estadística, Geología y Tecnología de Producción. Su edición es semestral y su objetivo general es difundir información científica.

En la revista pueden publicarse artículos originales, artículos de revisión, temas de actualidad reportes de casos, cartas al editor, y comunicaciones cortas (short communications).

CRITERIOS GENERALES DE PUBLICACIÓN

La Revista Reportes Científicos de la FACEN, se reserva todos los derechos de autor (copyright). El material publicado en la revista podrá reproducirse parcial o totalmente con la autorización expresa por escrito del Comité Editorial o el autor del artículo y se debe citar la fuente.

Los trabajos presentados para ser publicados deberán ser inéditos y originales y no podrán presentarse en otra revista mientras dure el proceso de revisión. Los trabajos publicados son responsabilidad de los autores y no necesariamente reflejan la opinión de la revista o de la Institución a la que pertenecen los autores. El idioma oficial de la revista es el español, aunque podrán aceptarse artículos en inglés.

PROCESO DE SELECCIÓN DE LOS ARTÍCULOS

Los principales criterios para la selección de los artículos son la solidez científica y la originalidad del tema. El proceso de evaluación incluye una primera revisión por el Comité Editorial para determinar si el artículo corresponde a la línea editorial y si cumple con los criterios generales de publicación. Una vez que el artículo se considere pertinente, se someterá a por lo menos dos revisores especialistas en el tema, de cuya opinión depende la aceptación definitiva del artículo. Si existiera una contradicción en la opinión de ambos especialistas, se someterá al Comité editorial o en caso contrario se solicitará una tercera opinión de

un tercer especialista. El dictamen podrá ser aceptado, rechazado o condicionado, que será comunicado por escrito al autor principal en un plazo no mayor de tres meses de la recepción del material original. Si el dictamen es condicionado, el autor deberá remitir la nueva versión impresa y en formato digital en el plazo que se le indique que no podrá exceder de los 30 días posteriores a la recepción de la comunicación.

ESPECIFICACIONES TECNICAS POR TIPO DE ARTÍCULO

1. Artículo científico original

El investigador principal de una investigación deberá presentar el artículo científico, en formato impreso adjuntando en la primera hoja, la firma de todos los autores, en donde expresen que aceptan la publicación del trabajo en la revista, y una copia en disco compacto dirigido a: Comité Editorial de Reportes Científicos de la FACEN, Dirección de Investigación de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Campus Universitario, San Lorenzo, Paraguay o a nuestra dirección de correo electrónico como archivo adjunto a cinvestigacion@facen.una.py, solicitando acuse de recibo. Debe estar corregido, sin faltas ortográficas o de estilo.

El trabajo científico debe tener un texto variable entre 10 y 25 páginas incluyendo cuadros y figuras y que se deriven de resultados de investigaciones o experimentaciones originales, que sigan la metodología científica y que posean resultados y discusión, y cuando el tipo de trabajo así lo amerite, en base a análisis estadísticos.

El texto debe ser procesado en Microsoft Word 6.0 o inferior con tipo de letra Times New Roman de 12 cpi, escrito a doble espacio. Las tablas y gráficos deben ser procesados en Microsoft Excel 6.0 o inferior, en archivos independientes. Las Figuras y los Gráficos pueden ser remitidos en formato digital jpg en archivos independientes.

El artículo científico debe contener los siguientes apartados: TÍTULO (en español e inglés), AUTORES, INSTITUCIÓN EN LA QUE TRABAJAN LOS AUTORES DIRECCIÓN ELECTRÓNICA DEL AUTOR RESPONSABLE (para la correspondencia), RESUMEN, PALABRAS CLAVES, ABSTRACT, KEY WORDS INTRODUCCIÓN, MATERIALES Y MÉTODOS, RESULTADOS Y DISCUSIÓN, AGRADECIMIENTOS y LITERATURA CITADA.

1.1. Título: (en español e inglés)

El título, debe dar una idea clara de lo que trata el trabajo. Debe ser breve, preciso y conciso. Debe contener hasta un máximo de 25 palabras. Estará ubicado en la primera página de la publicación. Debajo del título debe figurar el nombre del autor o de los autores; usar el sobrescrito 2 y número sucesivos para indicar, al pie de página, la Institución donde trabajan. Deberá indicarse cuál de los autores será el principal encargado de la correspondencia que habrá entre él y el cuerpo editorial en el proceso de revisión y preedición. A falta de esta información, el cuerpo editorial podrá asumir al primer autor como responsable de la correspondencia.

1.2. Resumen

Debe dar información sobre el propósito u objetivo del trabajo, lugar donde se realizó y los aspectos más destacables de MATERIALES Y MÉTODOS (sólo si es muy importante), RESULTADOS, CONCLUSIONES. No exceder de 150 palabras. La parte de MATERIALES Y MÉTODOS no debe sobrepasar 33 % del resumen. Debe ser redactado a renglón seguido, sin punto aparte, ni subtítulos. Debajo del resumen presentar hasta un máximo de diez palabras clave.

1.3. Abstract

Es el mismo Resumen redactado en inglés y conteniendo hasta un máximo de diez Key Words (Palabras Clave).

1.4. Introducción

En la introducción se debe informar sobre la importancia del tema. El tipo de problema encarado. Citas bibliográficas de trabajos similares o relacionados estrechamente con el tema que apoyan o respaldan el estudio y por último el objetivo del trabajo. Las informaciones, que no son del autor del trabajo, deben estar avaladas por citas bibliográficas. Cuando se hace participar al autor de la cita en la narración, sólo el año va entre paréntesis.

1.5. Materiales y Métodos

Se debe indicar el lugar donde se realizó el trabajo y reportar los datos necesarios y suficientes para que otros investigadores puedan repetir el trabajo o simplemente, verificar las condiciones en que fue realizado el experimento o la metodología seguida. Se presentará con claridad los tratamientos, las variables respuesta o parámetros de evaluación, el diseño estadístico empleado y el número de repeticiones. Se debe explicar cómo estuvo constituida la unidad experimental. Se deberá usar el Sistema Internacional de Medidas (SIU) y sus abreviaciones. Los nombres científicos deberán ser escritos en cursiva, el Género en mayúscula y la especie en minúscula. La primera vez que se nombra a la especie se puede utilizar todo el nombre científico. Las subsiguientes veces se puede utilizar la abreviación, especialmente si hay mucha repetición del nombre.

1.6. Resultados y Discusión

Los resultados deben ser expuestos claramente. Pueden ser presentados Cuadros o Figuras. Los gráficos, fotos, mapas y dibujos se denominarán figuras. Enumerar los cuadros con números arábigos en forma secuencial no importa si pertenecen a MATERIALES Y MÉTODOS o a RESULTADOS Y DISCUSIÓN, lo mismo para las figuras. El título del cuadro y de las figuras debe ser des-

criptivo dando idea cabal de lo que se trata y estará ubicado al pie de la figura o del cuadro. El cuadro resumen deberá contener los tratamientos en detalle, con el promedio de las variables respuesta, acompañadas de las letras que indican si las diferencias son significativas o no. Al pie del cuadro se colocarán las aclaraciones de las llamadas hechas en el cuadro. Los cuadros y las figuras deben estar referidas en el texto y ubicados lo más próximo a su llamada. No repetir la información del cuadro con una figura. En la discusión resaltar los logros relacionándolos con los resultados de otros autores. Tratar de explicar el porqué de los resultados obtenidos, haciendo referencia a investigadores especialistas en el tema.

1.7. Agradecimientos

Deben ser breves y dirigidos a personas o entidades sin las cuales el trabajo no hubiera sido posible. Serán incluidas antes de LITERATURA CITADA

1.8. Literatura citada

Hacer un listado, en orden alfabético, de las obras citadas en el texto. Cuando las referencias de un mismo autor coinciden en el año, diferenciarlas con letras seguidas del año.

1.9. Normas para la literatura citada

1.9.1) Libros y Folletos según el formato APA Harvard

AUTOR.//AÑO.//Título: subtítulo.//Edición.//
Local de publicación: Editora.//Número de páginas.//(Serie, nº).

AUTOR DEL CAPÍTULO.//AÑO.//Título del Capítulo.//In: Autor del libro.//Título del libro.//Edición.//Local de publicación: Editora.//Volumen, capítulo y/o página inicial-final de la parte referida.

AUTOR DEL LIBRO.//AÑO.//Título del Libro.//
Local de publicación: Editora.//Capítulo, página inicial-final: Título del Capítulo/parte.

1.9.2) Tesis y Disertaciones

AUTOR.//AÑO.//Título.//Local de publicación.//
Número de páginas.// Tesis/ Disertación (colocar el Grado al que corresponde la tesis)-Institución.

1.9.3) Artículos de Revistas

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título de la revista, volumen(fascículo): página inicial-final.

1.9.4) Trabajos en Eventos (Congresos...)

AUTOR.//AÑO.//Título del trabajo.//In: Título del Evento, Número, local, año de realización.//Título de la publicación.//Local de publicación: Editora.//Volumen y/o página inicial-final.

1.9.5) Resúmenes de Artículos Científicos

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título del periódico, volumen, fascículo, página inicial-final.///Resumen nº en Título del Abstracts, volumen, fascículo, página inicial-final, año de publicación del Abstract.

1.9.6) CD-ROM

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título de la Revista, volumen (fascículo): página inicial-final.///Resumen en Título de la Base de Datos en CD-ROM, Vol., año.

1.9.7) Internet

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título de la Revista, volumen (fascículo): página inicial-final.///Dirección en Internet//Fecha y hora de la consulta realizada.

2. Artículo de revisión

Documento resultado de una investigación donde se analizan, sistematizan e integran los resultados de investigaciones publicadas o no publicadas, sobre un campo en ciencia o tecnología, con el fin de dar cuenta de los avances y las tendencias de desarrollo. Se caracteriza por presentar una cuidada revisión bibliográfica de por lo menos 50 referencias.

3. Temas de actualidad

Serán solicitadas por el comité editorial al igual que los artículos de revisión deberán aportar un real interés científico, pero sin la profundidad de análisis crítico que requiere un artículo de revisión. Requiere de un resumen no estructurado, una introducción, texto y conclusiones. Puede incluir no más de cuatro gráficas o figuras. Deberá constar de: 1. Título en español y en inglés (no más de 250 palabras), 2. Resumen y palabras claves, en español y en inglés, 3. Desarrollo del tema, 4. Conclusión, 5. Bibliografía.

4. Reporte de casos

Se describen casos clínicos de uno a tres pacientes o una familia entera. En este caso el texto deberá tener un máximo de 2000 palabras sin incluir referencias. Deberán constar los siguientes puntos 1. Título en español y en inglés, 2. Resumen y palabras claves, en español y en inglés, 3. Una breve introducción, 4. Presentación de los casos, 5. Discusión de caso en base a la literatura y si es posible incluir el diagnóstico diferencial, 6. Referencias (no más de 25), 7. Tablas y figuras, en total tres.

5. Cartas al editor

Son comunicaciones cortas con varios objetivos. 1) Estimular la discusión de los artículos publicados en REPORTE CIENTÍFICOS DE LA FACEN. Se invita a la comunidad científica a escribir críticas constructivas no mayores a dos pági-

nas y en un tiempo no mayor a dos meses después de publicado el artículo en cuestión. 2) Comunicación de observaciones científicas breves en las que el autor considere que no se requiere el espacio de un artículo original. En este caso se permitirá un máximo de 3 páginas, una tabla o figura y cinco referencias bibliográficas. La cantidad de autores no deberá exceder de tres, teniendo un autor responsable del cual se enviará la correspondencia.

6. Comunicaciones cortas (short communications)

Comunicaciones que involucran pocos resultados en general preliminares que no alcanzan para una publicación completa (full papers). Estas comunicaciones serán hechas siguiendo los ítems de una publicación completa pero en forma sucinta, de manera que todo el trabajo alcance 3 páginas como máximo. Los demás ítems se harán igual que para una comunicación completa (agradecimiento, bibliografías, figuras).

7. Editorial

Documento escrito por el editor, un miembro del comité editorial o un investigador invitado sobre orientaciones en el dominio temático de la revista.

8. Otras secciones

Resúmenes de congresos, jornadas o reuniones científicas, normas y especificaciones técnicas.

ANEXO I.

GUÍA PARA LA PRESENTACIÓN DE ARTICULOS CIENTÍFICOS

El investigador principal de una investigación deberá presentar el artículo científico, en formato impreso y en formato electrónico, siguiendo las normas contenidas en el presente Anexo.

El artículo científico debe tener un texto variable de 10 a 25 páginas, que deriven de resultados de investigaciones o experimentaciones originales, que sigan la metodología científica y que posean resultados y discusión con base en análisis estadísticos cuando el trabajo lo amerite.

El texto debe ser procesado en Microsoft Word 6.0 o inferior con tipo de letra Times New Roman de 12 cpi, escrito a doble espacio. En el texto, en los lugares donde deben ir las Figuras (fotos, gráficos y similares) o los Cuadros (Tablas y similares) se colocará con numeración correlativa la Figura o el Cuadro que corresponde. Ej.: Cuadro 1, Cuadro 2; Figura 1; Figura 2.

Los Cuadros y Figuras se presentarán en hojas separadas en numeración correlativa diferenciada para cada uno. Ej. Cuadro 1, Cuadro 2; Figura 1, Figura 2. Las fotografías serán considerada Figuras y deberán ser de tamaño postal. Las Figuras y los Gráficos deberán ser remitidos en formato digital en archivos independientes. Ej. Cada foto en un archivo diferente; los gráficos en Excel 6.0 o inferiores, en archivo independiente, los cuadros o tablas en archivos independientes, etc. Los archivos magnéticos de las Figuras o los Cuadros, deberán denominarse de manera coherente con su numeración, evitando poner nombres específicos. Así, se utilizará la denominación “Cuadro 1” en lugar de “Efectos del extracto de...”; “Figura 1” en lugar de “grafico dosis/efecto”. Los mismos archivos se entregan comprimidos en formato RAR o ZIP, tamaño mínimo de las imágenes 800px X 600px, y tamaño máximo 1600px X 1200px, imágenes satelitales y mapas con formato jpg y con respaldo en formato sph o cat.

El artículo científico debe contener las partes siguientes: TÍTULO, RESUMEN, ABSTRACT, INTRODUCCIÓN, MATERIALES Y MÉTODOS, RESULTADOS Y DISCUSIÓN, AGRADECIMIENTOS Y LITERATURA CITADA.

1) Título en español e inglés

El título, debe dar una idea clara de lo que trata el trabajo. Debe ser breve, preciso y conciso. Debe contener hasta un máximo de 25 palabras. Estará ubicado en la primera página de la publicación. Debajo del título debe figurar el nombre del autor o de los autores; usar el sobrescrito 2 y número sucesivos para indicar, al pie de página, la Institución donde trabajan. Deberá indicarse cuál de los autores será el principal encargado de la correspondencia que habrá entre él y el cuerpo editorial en el proceso de revisión y pre-edición. A falta de esta información, el cuerpo editorial podrá asumir al primer autor como responsable de la correspondencia.

2) Resumen

Debe dar información sobre el propósito u objetivo del trabajo, lugar donde se realizó y los aspectos más destacables de MATERIALES Y MÉTODOS (sólo si es muy importante), RESULTADOS, CONCLUSIONES. No exceder de 150 palabras. La parte de MATERIALES Y MÉTODOS no debe sobrepasar 33 % del resumen. Debe ser redactado a renglón seguido, sin punto aparte, ni subtítulos. Debajo del resumen presentar hasta un máximo de diez palabras clave.

3) Abstract

Es el mismo Resumen redactado en inglés y conteniendo hasta un máximo de diez Key Words

(Palabras Clave).

4) Introducción

En la introducción se debe informar sobre la importancia del tema. El tipo de problema encarado. Citas bibliográficas de trabajos similares o relacionados estrechamente con el tema que apoyan o respaldan el estudio y por último el objetivo del trabajo.

Las informaciones, que no son del autor del trabajo, deben estar avaladas por citas bibliográficas. Cuando se hace participar al autor de la cita en la narración, sólo el año va entre paréntesis. Ejemplo:

- 1- ... académico, utilizando el planteo de Garnica (1987)
- 2- ... las reacciones de recombinación del carbano CFCL con CF₂ y con CFCL Caballero (1999)

Cuando el autor o los autores no participan en la narración entonces tanto el autor o los autores con los respectivos años van entre paréntesis. Ejemplo:

- 1- probablemente como respuesta al cambio de las condiciones hidrogeológicas. Hayes & Fox (1991) y Hayes (1991) mostraron. . .
- 2- ... Una séptima especie (Placosoma sp.)

fue registrada mas recientemente (Fariña y Hostettler, 2003) y una octava ...

- 3- ... de la población en el territorio nacional, la cual se estima entre 2500 a 1000.000 individuos (Zarza y Morales, 2007)
- 4- La población indígena y rural utilizan para controlar la fecundidad ... (MORENO AZORERO, 2002; FERNANDEZ Y FRANCO, 2004).

Cuando el trabajo citado tiene más de dos autores se usará el apellido del primero seguido por et al. Ejemplos:

- 1- ... la segunda interacción directa (International Atomic Energy Agency, 1986; Jianlin et al., 2007)
- 2- FERNANDEZ et al. (2004) encontraron que el principio activo de
- 3- ... que un echo físico de causa – efecto (Vallerga et al., 2006)
- 4- Variables sea mucho menor que el individuos (Hair et al, 2002; Cuadras Avellana, 1981).

5) Materiales y Métodos

Se debe indicar el lugar donde se realizó el trabajo y reportar los datos necesarios y suficientes para que otros investigadores puedan repetir el trabajo o simplemente, verificar las condiciones en que fue realizado el experimento o la metodología seguida. Se presentará con claridad los tratamientos, las variables respuesta o parámetros de evaluación, el diseño estadístico empleado y el número de repeticiones. Se debe explicar cómo estuvo constituida la unidad experimental. Se deberá usar el Sistema Internacional de Medidas (SIU) y sus abreviaciones. Los nombres científicos deberán ser escritos en cursiva, el Género en mayúscula y la especie en minúscula. Ejemplo: *Bachia bresslaui*. La primera vez que se nombra a la especie se puede utilizar todo el nombre científico. Las subsiguientes veces se puede utilizar la abreviación, especialmente si hay mucha repetición del nombre científico. Ejemplo: *B. bresslaui*

Se debe usar símbolos o fórmulas para compuestos químicos, especialmente si hay mucha repetición. Se recomienda usar nombres comunes de ingredientes activos de formulaciones químicas en lugar de nombres comerciales.

6) Resultados y Discusión

Los resultados deben ser expuestos claramente. Pueden ser presentados Cuadros o Figuras. Los gráficos, fotos, mapas y dibujos se denominarán figuras. Enumerar los cuadros con números arábigos en forma secuencial no importa si pertenecen a MATERIALES Y MÉTODOS o a RESULTADOS Y DISCUSIÓN, lo mismo para las figuras. El título del cuadro y de las figuras debe ser descriptivo dando idea cabal de lo que se trata y estará ubicado al pie de la figura o del cuadro. El cuadro resumen deberá contener los tratamientos en detalle, con el promedio de las variables respuesta, acompañadas de las letras que indican si las diferencias son significativas o no. Al pie del cuadro se colocarán las aclaraciones de las llamadas hechas en el cuadro. Los cuadros y las figuras deben estar referidas en el texto y ubicados lo más próximo a su llamada. No repetir la información del cuadro con una figura. En la discusión resaltar los logros relacionándolos con los resultados de otros autores. Tratar de explicar el porqué de los resultados obtenidos, haciendo referencia a investigadores especialistas en el tema.

7) Agradecimientos

Deben ser breves y dirigidos a personas o entidades sin las cuales el trabajo no hubiera sido posible. Serán incluidas sólo antes de LITERATURA CITADA.

8) Literatura citada

Hacer un listado, en orden alfabético, de las obras citadas en el texto. Cuando las referencias de un mismo autor coinciden en el año, diferenciarlas con letras seguidas del año. Ejemplo: González, A. 1998...; González, A. 1998a...; González, A. 1998b... Seguir lo indicado en el Punto 10 de este documento.

10) Normas para la literatura citada (Observación: Las dos barras (//) significan 2 espacios)

10.1) Libros y Folletos

AUTOR.//AÑO.//Título: subtítulo.//Edición.//
Local de publicación: Editora.//Número de
páginas.//(Serie, nº).

Ejemplo:

Con menos de tres autores

DI FIORE, M. 1975. Diagnostico histológico. 1ra. Edición. Buenos Aires Argentina. El Ateneo. 87p.

SORIA, N.; BASULDO, I.; Medicina Herbolaria de la comunidad Kavaju Kangue, Departamento de Caazapá Paraguay. Caazapá Paraguay. Edición Silvia Ocampos Araujo. Presidencia de la República. 138p.

Con más de tres autores

Indicación de todos los autores, o indicar los tres primeros separados entre sí por punto y coma (;) seguidos de la expresión et al.

Ejemplo:

ACUÑA, M.; CASTELLÓN, E.; CIFUENTES, L. et al. 1998. Problemas de biología celular. 1998. Primera edición. Santiago de Chile. Editorial Universitaria. 334p.

10.2) Capítulo (o parte) de libros

Con autoría específica

AUTOR DEL CAPÍTULO.//AÑO.//Título del Capítulo.//In: Autor del libro.//Título del libro.//Edición.//Local de publicación: Editora.//Volumen, capítulo y/o página inicial-final de la parte referida.

Ejemplo:

Rozman, K.; Klassen, C. 2005. Absorción, distribución y excreción de las sustancias tóxicas. In: KLASSEN, C.; WATKINS, J. Casarett y Doull fundamentos de toxicología. Primera Edición. España: McGraw-Hill/Interamericana de España. Unidad 2 Capitulo 5, p. 65-76.

Sin autoría específica

AUTOR DEL LIBRO.//AÑO.//Título del Libro.//
Local de publicación: Editora.//Capítulo, página inicial-final: Título del Capítulo/parte.

Ejemplo:

MENSUA, J. 2003. Genética problemas y ejercicios resueltos. Madrid España. Person Educación S.A. Capitulo (4) 88-140: Herencia en relación con el sexo: Herencia influenciada por el sexo/Fenotipos de hembras y machos para un carácter influenciado por el sexo.

10.3) Tesis y Disertaciones

AUTOR.//AÑO.//Título.//Local de publicación.//
Número de páginas.// Tesis/ Disertación (colocar el Grado al que corresponde la tesis)-Institución.

Ejemplo:

SILGUERO, N. 2009. Algunos modelos matemáticos sobre algunos neurotransmisores y neuromoduladores cerebrales determinación de parámetros por la teoría de curvas Alfa – Densas. 67p. Disertación (Maestría) Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad Nacional de Asunción.

10.4) Artículos de Revistas

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título de la revista, volumen(fascículo): página inicial-final.

Ejemplo:

ROJAS, H. 2010. Calidad de agua del embalse de Yasyreta en la cota de 76 metros sobre el nivel del mar. Reportes científicos de la FACEN. Vol 1 Nro1 40 – 55. 2010

CABALLERO, N.; CROCE, A.; COBOS, C. 2010. Estudio cinético de la reacción CF₂ + CF₂ + He A 294k. Reportes científicos de la FACEN. Vol 1 Nro1 3-9, 2010

CABAÑAS, D.; MOLINAS, C.; CABRAL, M.; et

al. 2010. Valoración de la calidad de la atención en los servicios de salud infantil según la percepción de usuarias /os en Asunción y departamento Central periodo 2007-2008. Reportes científicos de la FaCEN. Vol 1 Nro1 56-79

10.5) Trabajos en Eventos (Congresos...)

AUTOR.//AÑO.//Título del trabajo.//In: Título del Evento, Número, local, año de realización.//Título de la publicación.//Local de publicación: Editora.//Volumen y/o página inicial-final.

Ejemplo:

SOSA, V.; 2009. Entalpias de formación de nitrocompuestos aromáticos calculada con el modelo AB infinito de Guthrie. In XVII Jornadas de jóvenes investigadores, 1., Concordia Entre Rios Republica Argentina. Libro de Resúmenes. Eduner. 247p.

10.6) Resúmenes de Artículos Científicos

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título del periódico, volumen, fascículo, página inicial-final.///Resumen nº en Título del Abstracts, volumen, fascículo, página inicial-final, año de publicación del Abstract.

Ejemplo:

GALEANO, ME.; AMARILLA, A.; PARRA, G.; 2007. Productividad científica del Pa-

raguay en el área de biomedicina: un análisis bibliométrico. Memorias del instituto de investigación en ciencias de la salud. Vol 5(1). p26.

10.7) CD-ROM

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título de la Revista, volumen (fascículo): página inicial-final.///Resumen en Título de la Base de Datos en CD-ROM, Vol., año.

Ejemplo:

TARBUCK, J.; LUTGENS, .F.; 2005. Ciencias De La Tierra. Una Introducción A La Geología Física; Formación de Montañas y Evolución de Continentes. (20): 463-4873. Resumen y Graficas en CD-Rom.

10.8) Internet

AUTOR.//AÑO.//Título del artículo.//Título de la Revista, volumen (fascículo): página inicial-final.///Dirección en Internet//Fecha y hora de la consulta realizada.

Ejemplo:

CHU, Y.; OWEN, R.; GONZALEZ, L.; et al.; 2003 The complex ecology of hantavirus in Paraguay, Trop Med Hyg, (69): 263 - 268. <http://www.ajtmh.org/cgi/content/abstract/69/3/263> ; 10 de septiembre del 2010.; 21:52 hs.

REPORTES CIENTÍFICOS DE LA FACEN

ÍNDICE DE CONTENIDOS

Rep. cient. FACEN	San Lorenzo (Paraguay)	Vol. 2, Nº 1	enero-junio de 2011	ISSN 2078-399X (versión impresa) ISSN 2222-145X (versión online)
-------------------	------------------------	--------------	---------------------	---

EDITORIAL

- 3 **Franco de Diana, D.** Año Internacional de la Química.

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 5-11 **Doncel, F.; Takashi Momiyama, T. & C. González.** Observación de la circunferencia de la Tierra en Paraguay.
- 12-23 **Giménez Sena, F. & X. Bordina i Simorra.** Procesos de ramificación: una aplicación en la población americana.
- 24-31 **Bernis Urbieta, D. A.; Caballero, N. B.; Badenes, M. P. & C. J. Cobos.** Estudio teórico de las propiedades moleculares del antibiótico cinoxacina al nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p).
- 32-37 **Benítez, R.; Caballero, N. B.; Badenes, M. P. & C. J. Cobos.** Estudio computacional del radical ClSO₂ al nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d).
- 38-44 **Caballero Gini, A.; Airaldi Wood, K.; Ferreira Riveros, M. & L. Romero Nardelli.** Anfibios de la Bahía de Asunción (Distrito de la Capital, Paraguay).

ARTÍCULOS DE REVISIÓN

- 45-72 **Baéz Presser, J. L.** Distinción Sismológica entre el manto Arqueozoico y el Proterozoico: la raíz de la litosfera bajo la Cuenca del Paraná, América del Sur.

COMUNICACIONES CORTAS

- 73-76 **Cacciali, P.** Nueva localidad para *Leptodeira annulata* (Serpentes: Dipsadidae) en la Región Oriental de Paraguay, y datos sobre su distribución.

COMUNICADOS DEL CUERPO EDITORIAL

- 77-84 Guía para la presentación de artículos científicos en la revista "Reportes Científicos de la FaCEN".

