

EFyQS 2024

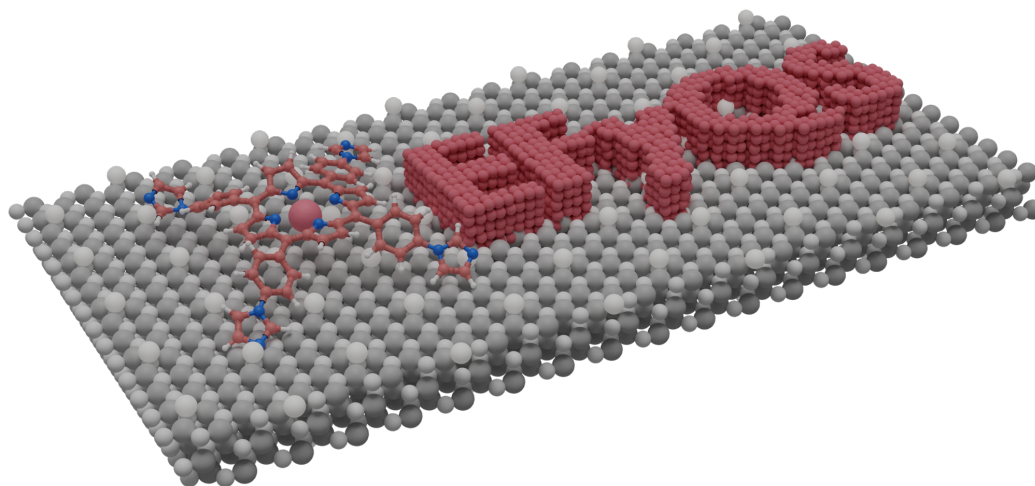
X ENCUENTRO DE FÍSICA Y QUÍMICA DE SUPERFICIES

6-8 de Noviembre de 2024

Centro Atómico Bariloche

Av. Bustillo Km. 9.5

San Carlos de Bariloche, Argentina



Índice general

Sobre el encuentro	3
Historia	3
X-EFyQS	3
Comite Organizador	3
Cronograma	4
Miércoles, 6 de Noviembre	4
Jueves, 7 de Noviembre	5
Viernes, 8 de Noviembre	6
Lista de Resúmenes - Charlas	7
Miércoles 6 de Noviembre	7
Jueves 7 de Noviembre	13
Viernes 8 de Noviembre	20
Lista de Resúmenes - Posters	23
Sesión del Miércoles 6 de Noviembre	23
Sesión del Jueves 7 de Noviembre	56
Información Útil	87
Sponsors	88

Sobre el encuentro

El Encuentro de Física y Química de Superficies (EFyQS) es un evento que reúne periódicamente a investigadores de la Argentina y el mundo que trabajan alrededor de un interés común: las propiedades fundamentales de las superficies sólidas y su interacción con átomos y moléculas adsorbidas.

Historia

El primer EFyQS se realizó en el año 2004 en las instalaciones del Centro Atómico Bariloche (CAB), motivado por el boom de la nanotecnología y la necesidad de establecer vínculos entre grupos de investigación nacionales que, aunque trabajaban en problemas de fisicoquímica similares, no tenían un contacto fluido simplemente por pertenecer a diferentes comunidades o asociaciones científicas de nuestro país.

Desde entonces este espacio se mantuvo vigente a través de Encuentros bianuales realizados en distintas ciudades del país: Vaquerías-Córdoba (2006), Bahía Blanca (2007), La Plata (2009), Rosario (2011), Río Cuarto (2014), Santa Fe (2016), San Luis (2018) y Santiago del Estero (2022).

X-EFyQS

El encuentro es organizado por el **Departamento de Física de Superficies** de la Comisión Nacional de Energía Atómica. Las actividades del mismo se desarrollan en el Centro Atómico Bariloche, ubicado en la ciudad de San Carlos de Bariloche, provincia de Río Negro. Pasen a visitarnos en este [link](#).

Comite Organizador

Hugo Ascolani (Copresidente)	Silvina Bengió (Copresidente)	
Gisela Bocan	Esteban D. Cantero	Javier Fuhr
Esteban Gayone	Oscar Grizzi	Christian Helman
Luis Rodríguez	Pablo Ruora	Gustavo Ruano
Esteban Sánchez	Laura Serkovic	Andrea Lucero Manzano
Thomas Barrientos	Lucas López	

Cronograma

CI: Charla Invitada, CO: Contribución Oral

Miércoles, 6 de Noviembre

8:30–9:00			Registro
9:00–9:20			Acto de Apertura
9:20–10:20	CI	Hans-Peter Steinrück	Molecules in Energy Storage and Release A Surface Science Perspective
10:20–10:45	CO	Martín Negri	Generación de electricidad mediante procesos naturales en superficies poliméricas
10:45–11:00			Coffee Break
11:00–12:00	CI	Phil Woodruff	Determining the structure of molecular adsorption phases; why STM and DFT alone are not enough
12:00–12:25	CO	Federico Williams	Reacciones químicas de moléculas de porfirina en superficies
12:25–14:00			Almuerzo
14:00–15:00	CI	Ignacio Piquero-Zulaica	Nanoarquitecturas moleculares en superficies: desde la ingeniería de paisajes electrónicos hasta la exploración de estructuras de bandas no convencionales
15:00–15:15			Coffee Break
15:15–15:40	CO	J. Michael Gottfried	Síntesis en superficie y manipulación de moléculas individuales: métodos versátiles para la fabricación con precisión atómica de nanomateriales de carbono
15:40–16:05	CO	Federico Soria	Explorando la Dinámica Molecular Reactiva ReaxFF: Descomposición Térmica, Redes Supramoleculares y Adsorción en Nanomateriales
16:10–19:00			Sesión de Posters

CI: Charla Invitada, CO: Contribución Oral

Jueves, 7 de Noviembre

9:00–10:00	CI	Andrés F. Santander-Syro	Sistemas de electrones 2D en superficies de óxidos de metales de transición
10:00–10:25	CO	Esteban D. Cantero	Caracterización del crecimiento de antimonio en Ag(111): desde su aleación superficial hasta la formación de α -antimoneno
10:25–10:40	Coffee Break		
10:40–11:40	CI	Pilar Segovia	Electronic structure of Li_xCoO_2 thin films upon Lithium deintercalation
11:40–12:05	CO	Camila Buono	Modelo de Distribución Exponencial de Vacantes para la Conducción Eléctrica en Uniones Metal-Semiconductor de ZnO
12:05–12:30	CO	Lucas Melia	Heteroestructuras de Ni/Grafeno/ZnO potencialmente escalables para la remediación de aguas contaminadas
12:30–14:00	Almuerzo		
14:00–15:00	CI	Emilia A. Carbonio	Develando la química de superficies de materiales en condiciones de reacción mediante espectroscopia de fotoelectrones y absorción de rayos X en condiciones operando
15:00–15:15	Coffee Break		
15:15–15:40	CO	Lucía M. Toscani	Cermets bimetálicos de Ni-Fe/CeO ₂ -ZrO ₂ como electrodos para celdas de combustible tipo SOFC: estudios in-situ por NAP-XPS y NEXAFS en atmósferas de H ₂ y CH ₄ /CO ₂
15:40–16:05	CO	Gabriela Cabeza	Estudio teórico-experimental comparativo de oxihaluros de bromo e yodo empleados como fotocatalizadores y bactericidas
16:10–19:00	Sesión de Posters		

CI: Charla Invitada, CO: Contribución Oral

Viernes, 8 de Noviembre

9:00–10:00	CI	J. Iñaki Juaristi	Comprendiendo las Reacciones Fotoinducidas Ultrarrápidas en Superficies Metálicas
10:00–10:25	CO	Paula Buitrago	Análisis de interacciones moleculares, electrónicas e iónicas con superficies de materiales van der Waals
10:25–10:40	Coffee Break		
10:40–11:05	CO	Paula S. Cappellari	Importancia atómica del Au en la difusión de CO en superficies de Pt: un estudio de DFT.
11:05–11:30	CO	Sofía V. Piguillem	Aptasensor basado en AuNRs@MIL100(Fe)_cisteína con detección impedimétrica de trombina para el diagnóstico temprano del daño cardiovascular
11:30–12:00	Acto de Clausura		
12:00–13:30	Almuerzo		
13:30–14:00	Reunión CC		

Miércoles 6 de Noviembre

CI Molecules in Energy Storage and Release - A Surface Science Perspective

Prof. Dr. Hans-Peter Steinrück*

Lehrstuhl für Physikalische Chemie II,
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen Nürnberg
D-91058 Erlangen, Egerlandstraße 3

In the time of the „Energiewende“, the conversion of renewable energies such as sunlight and wind to storable energy forms is a primary target of research. Equally important is the search for suitable chemical storage media, in addition to batteries, as well as reliable catalysts for back-conversion, that is, the on-demand release of energy in various forms. Making progress in these areas requires a fundamental understanding of the materials involved, and the relevant molecular processes. Our approach to obtain detailed molecular insights is to perform model surface science studies under well-defined conditions, mainly with in situ X-ray photoelectron spectroscopy using lab-sources or synchrotron radiation. In this presentation, we will discuss several examples where we have gained new insights: (1) Liquid Organic Hydrogen Carriers (LOHCs), which are important candidates for the large-scale storage of hydrogen; (2) Molecular Solar Thermal Energy (MOST) systems, which allow energy to be stored in strained chemical bonds; (3) the Solid Catalyst with Ionic Liquid Layer (SCILL) approach, in which a conventional heterogeneous catalyst surface is modified by an ultrathin ionic liquid film, to be potentially used in efficient back-conversion reactions.

*Funding was received by the Bavarian Ministry of Economic Affairs, regional Development and Energy, and by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) through the Excellence Cluster “Engineering of Advanced Materials” (2007-2019) and SFB 1452 “Catalysis at Liquid Interfaces”.

CO Generación de electricidad mediante procesos naturales en superficies poliméricas

Mariana D. Sosa(1) , Mar Cammarata(1), Noma B. D´Accorso(2), Mario Contin(3), Martín Negri(1)*

(1) Laboratorio de Materiales Compuestos y Energía (LAMCE). Instituto de Química Física de Materiales, Ambiente y Energía (INQUIMAE, Argentina). (2) Centro de Investigaciones en Hidratos de Carbono (CIHIDECAR, Argentina). (3) Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires

Se investigaron dos sistemas en los cuales se genera electricidad mediante procesos superficiales en la interface polímero-solución: 1) Electrificación por contacto (EC) polímero-solución: generación de cargas eléctricas por caída de lluvia sobre polímeros, 2) Producción de trabajo eléctrico en capacitores electrolíticos mediante la mezcla de agua dulce-salada (proceso CAPMIX), simulando situaciones en estuarios. Para el caso de EC se implementó un equipo que dispensa las gotas sobre la superficie de polímeros no-polares (politetrafluoroetileno, polietileno, poliestireno-divinilbenceno) modificados con distintos aditivos. Al rodar sobre el polímero las gotas se cargan eléctricamente y se generan corrientes espontáneas del orden del microampere. Se estudió el efecto del pH y fuerza iónica de las gotas, observando de la corriente con el pH, con cambio del signo de la carga en la zona de pH=3-5 (dependiendo del polímero). Un modelo de equilibrio ácido-base con sitios superficiales de protones y oxidrilos permite racionalizar todas las observaciones. Se discute la conexión de dicho proceso con otros involucrando la interacción agua-superficie, como aquellos determinantes de la magnitud de los coeficientes de fricción, la resistencia superficial y el potencial zeta del material.

En el caso CAPMIX, se implementó un sistema capacitivo con electrodos de pasta de grafito adicionando distintos polímeros (hidrofílicos e hidrofóbicos), al cual se lo carga inicialmente y que permite el flujo de soluciones acuosas. Al reemplazarse agua salada por agua dulce, a circuito abierto, disminuye el apantallamiento de las cargas superficiales, aumentando el campo eléctrico en la celda y, en consecuencia, aumentando la diferencia de potencia entre electrodos. Se estudió el efecto de la fuerza iónica. Mediante ciclos de dilución-descarga fue posible extraer trabajo eléctrico del orden de 100 $\mu\text{J}/\text{cm}^2$, analizando los resultados con un modelo de doble capa eléctrica.

CI Determining the structure of molecular adsorption phases; why STM and DFT alone are not enough

Phil Woodruff

University of Warwick, UK

The benchmark technique for quantitative determination of the location of adsorbed atoms and molecules on surfaces is still QLEED (quantitative low energy electron diffraction) in which the energy dependence of diffracted beams of low energy electrons are compared with simulations based on a range of alternative model structures. However, the use of QLEED has fallen out of favour for a number of reasons, including the computational demands of the simulations, but also the lack of elemental and chemical state specificity, of particular importance for adsorbed molecules. Nevertheless, a small number of alternative quantitative experimental methods are available. However, in recent years structural studies have been dominated by scanning tunnelling microscopy (STM) and density functional theory (DFT) calculations, either singly or together. STM provides real-space images with atomic resolution, but these images are of variations in the LDOS at the surface, and not, as they appear to be, of atomic positions. They provide a quantitative measure of the surface periodicity, but not of the atomic positions. DFT calculations provide the optimum atomic positions for specific model structures, but these structural 'solutions' depend on the initial choice of structural models.

One example of the limitations of the STM/DFT approach is in the study of 7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane (TCNQ) and its fluorinated variant, F4TCNQ on Au, Ag and Cu(111) surfaces. As isolated molecules these are rigidly planar, but they are strong electron donors, and when adsorbed on surfaces the transfer of electrons to the surface leads to the molecules becoming flexible. Over the last decade a series of

DFT publications have concluded that adsorbed on unreconstructed coinage metal surfaces these molecules adopt an umbrella configuration with the cyano N atoms some 0.5 Å closer to the surface than the core quinone ring. This structure is qualitatively consistent with STM images. However, NIXSW (normal incidence X-ray standing wave) measurements show that this structure is not correct; in most cases the molecules adopt a twisted confirmation. DFT calculations including the possibility of reconstruction of the outermost metal layer show that the NIXSW results are consistent with a structural model in which metal adatoms are incorporated into the adsorbed molecular layer. Surface X-ray diffraction provides direct experimental evidence for the presence and location of these metal adatoms.

CO Reacciones químicas de moléculas de porfirina en superficies

Federico Williams

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, INQUIMAE-CONICET, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellon 2, Buenos Aires C1428EHA, Argentina

Las moléculas de porfirina tienen una fuerte absorción UV-vis, excelente fotoestabilidad y una cavidad central donde pueden acomodar una amplia variedad de iones de metales de transición. Esta versatilidad permite ajustar fácilmente la reactividad química, así como las propiedades electrónicas, ópticas y magnéticas, proporcionando aplicaciones diversas en sensores, catálisis, celdas solares sensibilizadas por colorante y dispositivos fotoelectroquímicos y emisores de luz orgánicos. Las reacciones químicas que resultan en la inserción, intercambio o eliminación del átomo metálico de la cavidad central son importantes, ya que la identidad del metal central influye fuertemente en las propiedades de la molécula.

La metalación de porfirinas libres implica el intercambio de dos átomos de hidrógeno de los anillos de pirrol en la cavidad central por un ion metálico. En superficies, se ha observado la metalación en la interfaz sólido/vacío mediante la co-deposición de átomos metálicos en la superficie, a partir de átomos metálicos del sustrato o de iones de la red de un óxido. Las metaloporfirinas adsorbidas en superficies también pueden experimentar una transmetalación, donde el ion metálico central es reemplazado por átomos metálicos coadsorbidos o provenientes del sustrato. Finalmente, el ion metálico central puede ser eliminado de la cavidad central de la porfirina y reemplazado por dos protones, en una reacción conocida como desmetalación.

En este trabajo estudiamos las reacciones de metalación, transmetalación y desmetalación de moléculas de porfirina adsorbidas en superficies metálicas en la interfaz sólido/líquido. También investigamos estas reacciones con moléculas de porfirina unidas a monocapas autoensambladas (SAM). En este sistema, las moléculas de porfirina están separadas de la superficie metálica de Au(111) por la capa de SAM. Usando espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) y espectroscopía de estructura fina de absorción de rayos X en el borde cercano (NEXAFS), pudimos revelar la influencia de la superficie metálica en la reactividad molecular. Nuestros resultados brindan nueva información sobre las reacciones que involucran el centro metálico en porfirinas en superficies y, por lo tanto, son relevantes para el diseño de dispositivos moleculares basados en porfirinas.

CI Nanoarquitecturas moleculares en superficies: desde la ingeniería de paisajes electrónicos hasta la exploración de estructuras de bandas no convencionales

Ignacio Piquero-Zulaica [1]

[1] Physics department E20, Technical University of Munich, D-85748, Garching, Germany

Las superficies están en la frontera de todos los sólidos conocidos y a menudo, presentan diferentes estados electrónicos con respecto al resto. Para inducir nuevas propiedades cuánticas mediante difusión lateral y confinamiento, es de particular interés reducir con precisión atómica la dimensionalidad de los electrones de superficie. En la primera parte de la charla, me centraré en las investigaciones del confinamiento del estado de la superficie mediante redes nanoporosas (metal-)orgánicas 2D auto ensambladas de un solo átomo de espesor fabricadas en condiciones de ultra alto vacío [1]. Comenzando con el gas de electrones 2D cuasi-libre presente en los planos superficiales (111) de los metales nobles, se ilustra con medidas de microscopía y espectroscopía de efecto túnel (STM/STS) la intrigante complejidad y versatilidad estructural basada en moléculas. Siempre que las redes (metal-)orgánicas realizadas exhiban un orden a largo alcance, el potencial de la superficie es modificado. En consecuencia, surgen nuevas estructuras de bandas de superficie con rasgos característicos, que inducen fenómenos físicos notables como la discretización, el acoplamiento cuántico y una renormalización tanto en energía como en masa efectiva. Dichas bandas se miden con espectroscopía de fotoelectrones resuelta en ángulo (ARPES). Estos estados electrónicos colectivos pueden modificarse adicionalmente colocando átomos o moléculas en los nanoporos de dichas nanoarquitecturas. Además, las redes metal-orgánicas 2D pertenecen a una amplia familia de materiales cuánticos con propiedades emergentes tales como aislantes topológicos orgánicos, nanoimanes, superconductores y sistemas líquidos de espín cuántico. Para lograr tales propiedades, es necesario mejorar las interacciones metal-ligando, logrando una deslocalización eficiente de electrones. En la segunda mitad de la charla, mostraré varias redes metal-orgánicas 2D con estructuras mixtas de tipo honeycomb-kagomé y deslocalización eficiente de electrones. Esto induce la formación de estructuras de bandas no convencionales (por ejemplo, bandas planas, de Dirac y kagomé) y ferromagnetismo 2D [2,3].

[1] I. Piquero-Zulaica et al. Rev. Mod. Phys. 94, 045008 (2022)

[2] J. Lobo-Checa et al. Nat. Commun. 15, 1858 (2024)

[3] I. Piquero-Zulaica et al. Adv. Mater. 36, 2405178 (2024)

CO Síntesis en superficie y manipulación de moléculas individuales: métodos versátiles para la fabricación con precisión atómica de nanomateriales de carbono

Z. Ruan [1], Q.T. Fan [1], T. Naumann [1], H. Bettinger [2], U. Koert [1], P. Liljeroth [3], J. Michael Gottfried [1]

[1] University of Marburg, Germany; [2] University of Tübingen, Germany; [3] Aalto University, Finland

Los recientes avances en las técnicas de síntesis en superficie permiten la fabricación y caracterización

precisa de nanomateriales a base de carbono con una exactitud a escala atómica. Estos materiales suelen exhibir nuevas propiedades (opto-)electrónicas y magnéticas, que derivan en parte de las características inherentes de las moléculas precursoras y en parte emergen de las estructuras únicas formadas durante la síntesis. Por lo tanto, la síntesis en superficie se presenta como una alternativa altamente versátil a la química convencional en fase de solución, conduciendo a productos novedosos no obtenibles mediante métodos químicos convencionales.

Específicamente, la búsqueda de alótropos de carbono no bencenoides tipo sp^2 ha estimulado grandes esfuerzos de investigación debido a sus predichas propiedades mecánicas, (opto-)electrónicas y de transporte, únicas en su clase. Sin embargo, la síntesis de estas redes de carbono sigue siendo un desafío debido a la falta de protocolos fiables para generar anillos no hexagonales. Hemos desarrollado diversas estrategias de síntesis en superficie mediante las cuales las cadenas de polímeros se enlazan para formar redes de carbono no bencenoides. De esta manera, sintetizamos la red de bifenileno, un alótropo de carbono con anillos de 4, 6 y 8 miembros, que es metálico incluso a dimensiones muy pequeñas, así como otras redes de carbono. [1]

Un protocolo especialmente riguroso para la creación de nuevos materiales es la manipulación directa de átomos y moléculas con la punta de un microscopio de efecto túnel de barrido a baja temperatura. Aquí, utilizamos este método para fabricar tridecaceno (13ac) y pentadecaceno (15ac), los acenos más largos logrados hasta la fecha, mediante la manipulación de moléculas individuales en múltiples pasos. [2] Los acenos son otra clase importante de materiales de carbono con potencial para su uso en electrónica orgánica. Encontramos configuraciones de estado base de espín abierto antiferromagnético para ambos acenos. Es notable que el 15ac muestra una característica de excitación de espín a bajo sesgo, indicando una brecha singlete-triplete de alrededor de 124 meV. La investigación de complejos de 15ac con hasta 6 átomos de oro sugiere una considerable contribución multiradical al estado electrónico base del 15ac. Además, el dopaje con heteroátomos altera las propiedades electrónicas y magnéticas de los nanomateriales a base de carbono. Presentamos una variedad de nanoestructuras de carbono que contienen nitrógeno, incluidas cicloarenas planas y curvadas, así como nanocintas de grafeno dopadas con nitrógeno.

[1] Q.T. Fan, L-H. Yan et al., J.M. Gottfried, *Science* 372, 852-856 (2021).

[2] Z.L. Ruan et al., J.M. Gottfried, *J. Am. Chem. Soc.* 146, 3700-3709 (2024).

co Explorando la Dinámica Molecular Reactiva ReaxFF: Descomposición Térmica, Redes Supramoleculares y Adsorción en Nanomateriales

Federico Soria [1], Daniela Jaquelin [2], Patricia Paredes-Olivera [1], Cristiana Di Valentin [3] Eduardo M. Patrito [2]

[1]Departamento de Química Teórica y Computacional. [2] Departamento de Físicoquímica. [1][2]Instituto de Investigaciones en Físico Química de Córdoba (INFIQC-CONICET). Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina, [3] Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università di Milano Bicocca, Milano Italy

El empleo de simulaciones de dinámica molecular reactiva (ReaxFF) ha permitido explorar en profundidad diversos fenómenos en la química de superficies y nanomateriales. A continuación, se presentan tres ejemplos destacados de esta metodología.

En primer lugar, se investigó la descomposición térmica de monocapas orgánicas unidas a superficies de Si(111) y Si(100). Este estudio reveló cómo la flexibilidad de las estructuras de carbono influye

en su estabilidad térmica y cómo la orientación cristalina afecta la formación de productos en fase gaseosa[1].

Por otro lado, se estudiaron redes supramoleculares de ácido trimesico (TMA) en grafeno, donde se demostró que la disposición y las interacciones moleculares afectan la estabilidad térmica. Se exploraron configuraciones en panal, flor y zigzag, siendo la estructura de panal la más estable. Al aumentar la temperatura, la torsión de los grupos carboxílicos provoca la ruptura de enlaces puente hidrógeno y desordena la red [2a]. Además, se evaluó la estabilidad en presencia de estructuras huésped como coroneno, que estabiliza la red, y fullerenos, que tienden a desestabilizarla, resaltando la importancia de las interacciones host-guest[2b].

Finalmente, se analizó la adsorción de agua en nanopartículas esféricas de TiO_2 (2.2 a 4.4 nm). Se encontró que el agua se adsorbe tanto de forma molecular como disociativa, siguiendo una isoterma de Langmuir. A baja cobertura, una sola molécula de agua se disocia, mientras que a altas coberturas se produce un mecanismo de transferencia de protones tipo Grotthuss. Las nanopartículas más pequeñas mostraron mayor capacidad de adsorción que las más grandes y también superaron la adsorción en superficies planas de TiO_2 , gracias a su mayor cantidad de átomos de titanio de baja coordinación en la superficie[3].

Estos estudios destacan la capacidad de las simulaciones ReaxFF para ofrecer información detallada sobre la dinámica molecular y los mecanismos de reacción en sistemas superficiales complejos, lo que es fundamental para el diseño de nuevos materiales funcionales.

[1] Federico A. Soria, Weiwei Zhang, Patricia A. Paredes-Olivera, Adri. C. T. van Duin and Eduardo M. Patrito J. Phys. Chem. C 2018, 122, 23515, ACS Appl. Mater. Interfaces 2017, 9, 30969

[2] (a) Daniela K. Jacquelin, Federico A. Soria, Patricia A. Paredes-Olivera, Eduardo M. Patrito, ACS Appl. Nano Mater. 2021, 4, 9, 9241–9253 (b) Daniela K. Jacquelin, Federico A. Soria, Patricia A. Paredes-Olivera, Eduardo M. Patrito, Carbon 2024, 217, 118643.

[3] F.A. Soria and C. Di Valentin, Nanoscale, 2021,13, 4151-4166

Jueves 7 de Noviembre

CI Sistemas de electrones 2D en superficies de óxidos de metales de transición

Andrés F. Santander-Syro

Université Paris-Saclay
Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay
France

Los óxidos de metales de transición (TMO) muestran propiedades notables que no se encuentran en los semiconductores estándar, como la superconductividad a alta temperatura, la capacidad fotocatalítica, o las transiciones de metal a aislante. La realización de gases de electrones bidimensionales (2DEG) en estos óxidos es crucial para aprovechar las funcionalidades de estos materiales en aplicaciones futuras. Además, estos 2DEG ofrecen la posibilidad de explorar nuevos fenómenos que surgen de los efectos combinados de las correlaciones electrónicas y el confinamiento en dos dimensiones.

En nuestro grupo, descubrimos que tales 2DEG se pueden realizar de manera sencilla en la superficie de varios TMO aislantes, como el SrTiO_3 [1], un paraeléctrico cuántico, el KTaO_3 [2], un óxido con un fuerte acople spin-órbita, o el foto-catalizador TiO_2 [3]. En esta charla describiré esos 2DEG, y mostraré cómo la elección de la terminación de la superficie permite adaptar la estructura electrónica y las simetrías de estos 2DEG [4-5], allanando el camino para la búsqueda de estados topológicos en óxidos correlacionados. Además, analizaré nuestra observación de magnetismo en el 2DEG en la superficie deficiente en oxígeno de SrTiO_3 [6]. Luego describiré nuestro reciente desarrollo de un método simple para fabricar estos 2DEG en varios otros óxidos, como el ferroeléctrico BaTiO_3 [7] o el semiconductor ZnO [8]. Esta novedosa técnica de fabricación permite diseñar interfaces funcionales entre el 2DEG y, por ejemplo, capas magnéticas ajustables [9], y medir sus características de transporte [10], y por lo tanto es prometedora para aplicaciones.

- [1] A. F. Santander-Syro et al., *Nature* 469, 189 (2011).
- [2] A. F. Santander-Syro et al., *Phys. Rev. B* 86, 121107(R) (2012).
- [3] T. C. Rödel et al., *Phys. Rev. B* 92, 041106(R) (2015).
- [4] C. Bareille et al., *Sci. Rep.* 4, 3586 (2014).
- [5] T. C. Rödel et al., *Phys. Rev. Applied* 1, 051002 (2014).
- [6] T. Taniuchi et al., *Nat. Commun.* doi: 10.1038/NCOMMS11781 (2016).
- [7] T. C. Rödel et al., *Adv. Mater.* doi:10.1002/adma.201505021 (2016).
- [8] T. C. Rödel et al., *Phys. Rev. Mater.* 2, 051601(R) (2018).
- [9] P. Lömkner et al., *Phys. Rev. Mater.* 1, 062001(R) (2017).
- [10] S. Sengupta et al. *J. Appl. Phys.* 124, 213902 (2018).

CO Caracterización del crecimiento de antimonio en Ag(111): desde su aleación superficial hasta la formación de α -antimoneno

A. R. Allouche [1], C. Sonny [1], H. Khemliche [1], A. Lucero-Manzano [3], O. Grizzi [2,3], L.N. Serkovic-Loli [3], C. Helman [3], E. D. Cantero [2,3], E.A. Sánchez [2,3]

[1] Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (CNRS – Université Paris-Sud), France. [2] Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo – Comisión Nacional de Energía Atómica, S.C. de Bariloche, Argentina. [3] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología - Nodo Bariloche (CNEA-CONICET), S.C. de Bariloche, Argentina

El antimoneno es un material bidimensional con interesantes propiedades fisicoquímicas y cuya sintetización hasta el momento ha sido lograda en dos fases estables: α y β . La fase β presenta una estructura cristalográfica tipo panal de abejas similar al grafeno y puede obtenerse mediante exfoliación mecánica o en fase líquida a partir de un bulk de antimonio. El α -antimoneno, por otra parte, presenta dos subcapas atómicas localizadas en distintos planos y su celda unidad es de tipo rectangular o cuadrada, pero no tiene una contraparte en el bulk de Sb, por lo que solo se lo puede obtener mediante métodos de fabricación bottom-up. La formación de antimoneno sobre distintos sustratos es un tema de gran interés tecnológico debido a la posibilidad de fabricar dispositivos que se beneficien de su alto band-gap, su destacado acoplamiento espín-órbita, propiedades ferro y termoeléctricas, y electrónicas en general. El estudio del crecimiento epitaxial de antimonio sobre superficies de Ag(111) es un tema de investigación abierto, dado que diversos grupos han reportado síntesis de α -y β -antimoneno sobre este sustrato con resultados que, analizados independientemente, resultan contradictorios. En este trabajo, presentaremos resultados sobre el crecimiento por evaporación de antimonio sobre Ag(111), desde el régimen sub-monocapa hasta varias capas atómicas, incluyendo estudios de su estructura cristalina y electrónica en las distintas fases de crecimiento; utilizando una gran variedad de técnicas de análisis complementarias (TOF-DRS, LEED, AES, UPS, XPS, Raman, DFT). Mostraremos que la estructura final que se forma corresponde a α -antimoneno, y que la fase reportada con simetría $(r3 \times r3)R30$ no es β -antimoneno como reportan varios autores, sino una aleación superficial de Ag_2Sb como han propuesto de manera parcial trabajos más recientes.

CI Electronic structure of Li_xCoO_2 thin films upon Lithium deintercalation

E. Salagre¹, P. Segovia^{1,2}, M.A. González-Barrio³, J. Pearson⁴, I. Takeuchi⁴, E.J. Fuller⁵, A.A. Talin⁵, M. Jugovac⁶, P. Moras⁶, A. Mascaraque³ and E.G. Michel^{1,2}

1. Dto Física Materia Condensada, Univ. Autónoma de Madrid, Spain

2. IFIMAC (Condensed Matter Physics Center), Univ. Autónoma de Madrid, Spain

3. Dto. Física de Materiales, Fac. Ciencias Físicas, Univ. Complutense de Madrid, Spain

4. Materials Science and Engineering, Univ. of Maryland, College Park (MD), USA

5. Sandia National Laboratories, Livermore (CA), USA.

6. Istituto di Struttura della Materia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Trieste, Italy

LiCoO_2 (LCO) is one of the most common cathode material in rechargeable Li-ion batteries, mainly

due to its high-energy capacity and good cyclability [1]. This material undergoes a complex, and not yet fully understood, set of phase transitions during Li deintercalation that plays a key role on battery performance and degradation. Stoichiometric LCO ($x=1$) is an insulator, but upon Li removal of 0.5 % ($x=0.95$) it undergoes an insulator to metal transition of yet unclear origin and interpretation (Mott vs. Anderson type)[2,3]. The metallic phase has the same crystalline structure (R-3m) as the insulating one, however it has slightly different lattice parameters. These two hexagonal phases coexist in the range $0.95 < x < 0.75$ [4]. The formation of the metallic phase is explained by hole doping of the Co t_{2g} band [5] after Li deintercalation, but the modifications experienced by the electronic structure are still controversial [2,3].

In this work we analyze high-quality epitaxial thin films of LCO grown by pulsed laser deposition on Nb-doped SrTiO₃(111). We perform high resolution Angle Resolved Photoemission Spectroscopy (ARPES), X-ray Spectroscopy (XPS) and X-ray Absorption Spectroscopy (XAS), using synchrotron light, to characterize the electronic properties of LCO for different Li molar fraction values (x). The changes in the electronic structure during the metal-insulator transition are observed under ultra high vacuum conditions and the quality of the surface has been verified thoroughly throughout the process. We obtain detailed Fermi surfaces and constant energy surfaces, as well as band dispersion maps for the discharged ($x=1$) and partially charged ($x < 1$) LCO epitaxial films. Information about the chemical and structural changes is obtained from high-resolution Co 3p, Li 1s and O 1s core levels and from the Co L and O K absorption edges.

The expected formation of Co⁴⁺ and of oxygen holes related to the metallization, are studied in the context of the partial hybridization of Co 3d and O 2p orbitals. We report the formation of a hole-like metallic band and measure the effective mass of the carriers, before and after Li deintercalation. A change in the band dispersion and a reorganization of spectral weights at the Fermi surface is also described for large hole doping levels. We present results that clarify the controversial topics regarding the metallization and charge compensation during Li deintercalation[4,6].

[1] Nitta N, Wu F, Lee J T and Yushin G 2015 Li-ion battery materials: Present and future Mater. Today 18 252–64

[2] Marianetti C A, Kotliar G and Ceder G 2004 A first-order Mott transition in Li_xCoO₂ Nat. Mater. 3 627

[3] Milewska A, Świerczek K, Tobola J, Boudoire F, Hu Y, Bora D K, Mun B S, Braun A and Molenda J 2014 The nature of the nonmetal-metal transition in Li_xCoO₂ oxide Solid State Ionics vol 263 (Elsevier) pp 110

[4] Miyoshi K, Manami K, Sasai R, Nishigori S and Takeuchi J 2018 Electronic states realized by the interplay between Li diffusion and Co³⁺/Co⁴⁺ charge ordering in Li_xCoO₂ Phys. Rev. B 98 195106

[5] Mizokawa T, Wakisaka Y, Sudayama T, Iwai C, Miyoshi K, Takeuchi J, Wadati H, Hawthorn D G, Regier T Z and Sawatzky G A 2013 Role of oxygen holes in Li_xCoO₂ revealed by soft X-ray spectroscopy Phys. Rev. Lett. 111 056404

[6] Okamoto Y, Matsumoto R, Yagihara T, Iwai C, Miyoshi K, Takeuchi J, Horiba K, Kobayashi M, Ono K, Kumigashira H, Saini N L and Mizokawa T 2017 Electronic structure and polar catastrophe at the surface of Li_xCoO₂ studied by angle-resolved photoemission spectroscopy Phys. Rev. B 96 125147

co Modelo de Distribución Exponencial de Vacantes para la Conducción Eléctrica en Uniones Metal-Semiconductor de ZnO

Camila Buono[1], *Mariela Desimone*[2] and *Celso M. Aldao*[1]

[1] Instituto de Investigaciones Científicas y Tecnológicas en Electrónica (ICYTE), Universidad Nacional de Mar del Plata, CONICET, Av. Juan B. Justo 4302, Mar del Plata, Argentina. [2] Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Universidad de Mar del Plata, CONICET, Av. Colón 10850, Mar del Plata, Argentina.

Los semiconductores de óxidos metálicos (MOX) se han convertido en materiales clave en aplicaciones industriales, especialmente en sensores de gases, que convierten variaciones en la concentración de gases en señales eléctricas correspondientes. Dentro de estos, el ZnO se destaca por su uso en dispositivos como sensores y otros componentes microelectrónicos. Estudiar los mecanismos de conducción eléctrica en uniones metal-semiconductor de ZnO es crucial para optimizar el rendimiento de estos dispositivos, especialmente a bajas temperaturas, donde los modelos tradicionales que asumen una distribución uniforme de vacantes no logran describir con precisión el comportamiento de la conducción, debido a los efectos de túnel que predominan.

En este trabajo, presentamos un modelo de distribución exponencial de vacantes, que incorpora la difusión de estas dentro de la región de agotamiento, generando barreras exponenciales en las uniones metal-semiconductor. Al comparar nuestro modelo con datos experimentales en monocristales de ZnO, encontramos que describe de manera más precisa la conductividad dependiente de la temperatura y el voltaje en estas uniones.

Este modelo ofrece una mejor comprensión de los procesos de conducción eléctrica en ZnO, proporcionando herramientas para el diseño de dispositivos semiconductores más eficientes, particularmente en condiciones de bajas temperaturas, donde las limitaciones de los modelos tradicionales se hacen evidentes.

CO Heteroestructuras de Ni/Grafeno/ZnO potencialmente escalables para la remediación de aguas contaminadas.

Melia, Lucas [1]; Juncal, Luciana [1]; Rabal, Sebastián [1]; Meyer, Marcos [1]; Muñetón David [2]; Gallegos, M. Victoria [3]; Ibañez, Francisco J. [2]; Damonte, Laura C [1].

[1] Instituto de Física La Plata (IFLP). CONICET - UNLP. Argentina; [2] Instituto de Investigaciones Físicoquímicas, Teóricas y Aplicadas (INIFTA). UNLP - CONICET. Argentina; [3] Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA). CONICET - UNLP - CIC. Argentina.

En el presente trabajo se utilizó la electrodeposición como una técnica sencilla, económica y escalable para crecer heteroestructuras de ZnO/Grafeno sobre espuma de Ni, con el objetivo de mejorar la remoción (adsorción + fotodegradación) del azul de metileno (MB). La espuma de Ni, previamente recubierta con grafeno mediante deposición química de vapor (CVD), gracias a su alta superficie expuesta, sirve como un sustrato ideal para el crecimiento de ZnO. Este enfoque permite un crecimiento de ZnO a bajos potenciales, favorecido por la presencia de grafeno, lo que resulta en una mayor uniformidad en la distribución de las nanoestructuras sobre la superficie de la espuma de Ni. Las heteroestructuras obtenidas fueron caracterizadas por difracción de rayos X (DRX), microscopía óptica, microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía de dispersión de energía (EDS), espectroscopía Raman, y espectroscopía UV-Vis. Los rayos X confirmaron la presencia de ZnO en la muestra Ni/G/ZnO. El análisis SEM+EDS confirmó un crecimiento uniforme de ZnO en la espuma de Ni recubierta con grafeno, en contraste con los depósitos irregulares observados en la espuma de Ni sin grafeno. Por espectroscopía Raman se pudo ver que el grafeno permanece luego de la aplicación

del potencial para crecer ZnO. Finalmente, las pruebas de fotodegradación revelaron que la muestra Ni/G/ZnO logró remover casi el 60 % del MB, duplicando la eficiencia de los catalizadores sin grafeno. Este estudio subraya las ventajas de la electrodeposición como una técnica accesible y escalable para la producción de dispositivos que pueden utilizarse para la remoción de aguas contaminadas. La combinación de ZnO con grafeno en un soporte de alta superficie expuesta, como la espuma de Ni, abre nuevas posibilidades para el desarrollo de procesos de degradación de contaminantes a gran escala, utilizando materiales no tóxicos y económicamente viables.

CI Develando la química de superficies de materiales en condiciones de reacción mediante espectroscopia de fotoelectrones y absorción de rayos X en condiciones operando

Emilia A. Carbonio^{1,2}

¹Catalysts for Energy, Energy Materials In-situ Laboratory (EMIL), Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, BESSY II, Albert-Einstein-Straße 15, 12489 Berlin, Germany.

²Department of Inorganic Chemistry, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin, Germany.

Los catalizadores heterogéneos son típicamente materiales sólidos que participan en la conversión de reactivos en productos sin consumirse en la reacción. Sin embargo, estos materiales no son rígidos y están sujetos a cambios bajo condiciones de reacción. El catalizador sintetizado puede considerarse como un precursor de la fase activa y el sitio activo, que se crea en condiciones operativas. La espectroscopia de fotoelectrones de rayos X a presión cercana a la presión ambiental (NAP-XPS) es una técnica de superficie que permite investigar materiales en condiciones de reacción, lo que nos permite estudiar los cambios (reversibles o irreversibles) que ocurren en la superficie de un catalizador en funcionamiento. La NAP-XPS combinada con la espectroscopia de absorción de rayos X a presión cercana a la presión ambiental (NAP-XAS) son técnicas experimentales adecuadas para estudiar la estructura electrónica, la fase/estado superficial del catalizador y las especies superficiales presentes y su cobertura en condiciones de reacción. Cuando estas técnicas se combinan con la detección de productos de una reacción (operando) nos permite identificar especies reactivas y especies en la superficie que están ligadas a la selectividad de las reacciones químicas hacia un determinado producto. Este conocimiento puede conducirnos a una mejor comprensión de los mecanismos de reacción y al desarrollo de mejores materiales catalíticos una vez conocido el estado/especie superficial activo de un catalizador. En esta presentación se mostrarán diferentes materiales de interés (electro)catalítico estudiados con NAP-XPS/XAS en condiciones in-situ y operando, mostrando la aplicación de estas técnicas para investigar las interfases sólido-gas y sólido-líquido. Se mostrará cómo la NAP-XPS/XAS en condiciones in-situ y operando puede utilizarse para identificar especies selectivas y detectar especies que sólo están presentes en la superficie en condiciones de reacción, siendo estas “invisibles” en los análisis pre-reacción y post-reacción del material (electro)catalítico.

CO Cermets bimetálicos de Ni-Fe/CeO₂-ZrO₂ como electrodos para celdas de combustible tipo SOFC: estudios in-situ por NAP-XPS y NEXAFS en atmósferas de H₂ y CH₄/CO₂

L.M. Toscani [1], M. D. Arce [2], M. Santaya [2], V. Pérez Dieste [3], I. J. Villar-García [3], Emilia A. Carbonio [4,5], A. Knop-Gericke [4,6], L.V. Moggi [2], M. Bär [4,7,8], C.E. Jimenez [4]

[1] ITECA-UNSAM-CONICET, Argentina; [2] INN-CNEA-CONICET, Argentina, [3] Sincrotrón ALBA, España; [4] Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie (HZB), Alemania; [5] Fritz-Haber-Institut, Alemania; [6] Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Alemania; [7] Friedrich-Alexander-Universität, Alemania; [8] Helmholtz Institute Erlangen-Nürnberg for Renewable Energy, Alemania.

En los últimos años, las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) han cobrado gran relevancia por su alta eficiencia en la conversión de energía y su versatilidad en la utilización de combustibles limpios. En este sentido, el desarrollo de una tecnología SOFC económicamente viable ha impulsado la investigación hacia la reducción de su temperatura de operación al rango de temperaturas intermedias (IT) (500°C-800°C). Por lo tanto, es necesario desarrollar nuevos materiales para ánodos que tengan alta actividad electrocatalítica y resistencia a la deposición de carbono cuando se utilizan hidrocarburos como combustibles. Los óxidos mixtos de CeO₂-ZrO₂ han sido ampliamente estudiados debido a sus propiedades redox y a su capacidad de almacenamiento de oxígeno, combinados con Ni, que exhibe una excelente actividad catalítica y electrocatalítica para la oxidación de hidrocarburos. Sin embargo, la formación de C se ve favorecida por las altas cargas de Ni requeridas para garantizar la percolación electrónica en el electrodo. Por lo tanto, se han propuesto cermets bimetálicos como una alternativa para reducir la formación de C mientras se mantiene la actividad catalítica.

En este trabajo, presentamos un soporte de CeO₂-ZrO₂ con conductividad iónica y electrónica mixta (MIEC) en atmósfera reductora, combinado con una aleación de Ni-Fe. Se espera que la modificación superficial mediante la formación de una aleación minimice la formación de C, al tiempo que se conserve la actividad catalítica y electrocatalítica. Así, las técnicas in-situ con radiación sincrotrón resultan clave para revelar los cambios superficiales inducidos tanto por la temperatura como por la atmósfera, especialmente cuando se utilizan combustibles basados en carbono. En este estudio, exploramos mediante espectroscopías de absorción y de fotoelectrones de rayos X a presión cercana a la ambiente (NAP-XPS/XAS) in-situ, cómo diferentes ambientes reactivos afectan la superficie del electrodo y la actividad catalítica. Se ensayaron pellets de Ni-Fe/CeO₂-ZrO₂ en mezclas de H₂, CH₄ y CH₄:CO₂ a temperaturas de hasta 650°C, y se analizó la especiación superficial. Los resultados muestran que después de la activación en H₂ y, al cambiar posteriormente a atmósferas de CH₄ y CH₄CO₂, el Ni permanece reducido, mientras que el Ce y el Fe se reoxidan parcialmente con el tiempo, sin evidencia de formación de C en la superficie. Estos resultados confirman que la modificación de la energía superficial del electrodo mediante la formación de una aleación puede ayudar a optimizar el rendimiento y la estabilidad del electrodo para extender el ciclo de vida de los dispositivos SOFC.

CO Estudio teórico-experimental comparativo de oxihaluros de bromo e iodo empleados como fotocatalizadores y bactericidas

A. Jiménez Gandica 1, C. I. N. Morgade 2, G. F. Cabeza 1

1 Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur - Instituto de Física del Sur Bahía Blanca, Argentina; 2 Universidad Tecnológica Nacional, FRBB, Bahía Blanca, Argentina Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur - Instituto de Física del Sur Bahía Blanca, Argentina

Los oxihaluros de bismuto (BiOX , $X = \text{Cl, Br, I, F}$) tienen una estructura en capas por lo que son frecuentemente considerados materiales bidimensionales. Esta estructura facilita la separación de cargas (electrones y huecos) cuando se exponen a la luz, siendo excelentes candidatos como fotocatalizadores. Entre sus propiedades distintivas se destacan por sus usos en el desarrollo de productos antibacterianos como la nanoestructura porosa y cristalina de $\text{BiOBr} \cdot 0.75\text{H}_2\text{O}$ que muestra actividades bactericidas enormemente altas incluso en la oscuridad [1].

En este trabajo, informamos sobre la síntesis y caracterización teórico-experimental del BiOBr [2] e BiOI empleando difracción de rayos X, microscopía electrónica de transmisión y cálculos de primeros principios basados en la Teoría de la Densidad Funcional. Los cálculos se realizaron empleando el paquete comercial VASP [3] e incluyendo fuerzas de Van der Waals (DFT-D3) [4].

Este trabajo tiene como objetivo comparar sus propiedades y poder explicar las peculiaridades de los cambios observados en la función dieléctrica, así como en el resto de las propiedades ópticas. También fue posible determinar los cambios en las propiedades producto de la síntesis. A partir de la comprensión básica de la estructura cristalina y propiedades electrónicas y ópticas del BiOI , BiOBr estudiamos la combinación de ellos en el sistema $\text{BiOBr} \cdot 0.75\text{H}_2\text{O}$ para analizar sus diferencias. El conocimiento sobre el comportamiento de estos materiales únicos revela un nuevo campo de investigación y ciertamente ayudaría a encontrar una solución a los problemas ambientales en constante aumento.

1. D. Pancholi et al, *Colloids and Surf. B: Biointerfaces* 199 (2021) 111558
2. C. I. N. Morgade, A. B. Schvval, S. A. Fuente, J. C. Durán Álvarez, C. Buono, P. M. Desimone, C. M. Aldao, G. F. Cabeza, *Topics in Cat.* 65 (2022) 824
3. G. Kresse, J. Hafner, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 14251
4. S. Grimme et al, *J. Chem. Phys.* 132 (2010) 154104

Viernes 8 de Noviembre

CI Comprendiendo las Reacciones Fotoinducidas Ultrarrápidas en Superficies Metálicas

J. Iñaki Juaristi [1][2][3]

[1] Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Química, UPV/EHU, Donostia-San Sebastián, Spain; [2] Centro de Física de Materiales CFM/MPC (CSIC-UPV/EHU, Donostia-San Sebastián, Spain; [3] Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastián, Spain

El uso de pulsos láser de femtosegundo intensos ($\sim 10 \text{ mJ/cm}^2$) en el régimen UV, VIS e IR cercano es una forma muy eficaz de promover reacciones en superficies metálicas cubiertas de adsorbatos. Para estas longitudes de onda, una gran fracción de la luz es absorbida por los electrones del metal. Posteriormente, la energía se transfiere a los átomos de la red a través del acoplamiento electrón-fonón. Como resultado, los adsorbatos pueden obtener energía de los electrones y de los fonones excitados y experimentar diferentes reacciones, difusión e incluso desorción de la superficie. Este tipo de mecanismo de excitación puede aumentar significativamente la sección eficaz de las reacciones con respecto a lo que se observa en condiciones ordinarias de excitación térmica e incluso abrir nuevos canales de reacción. Un modelado preciso de estos experimentos requiere realizar simulaciones de dinámica molecular multidimensional en las que participen los adsorbatos y los átomos de la superficie excitada, tratando la interacción adsorbato-superficie metálica a nivel de la teoría del funcional de la densidad e incluyendo el acoplamiento de los adsorbatos al sistema electrónico excitado. Esto se ha logrado mediante el modelo de «dinámica molecular ab initio con fricción electrónica y termostatos» desarrollado en nuestro grupo. El modelo incorpora tanto los canales de excitación electrónicos como fonónicos e incluye de forma natural todos los grados de libertad relevantes del sistema. El principal inconveniente de este método es el ser extremadamente exigente desde el punto de vista computacional, lo que limita el número de trayectorias que pueden calcularse y el tiempo de integración. Este problema se ha resuelto recientemente utilizando redes neuronales para construir superficies de energía potencial multidimensionales basadas en los datos ab initio, que permiten realizar las simulaciones de dinámica molecular requeridas con un coste computacional mucho menor. En esta charla, revisaré estos avances teóricos y su aplicación a dos importantes procesos inducidos por pulsos láser de femtosegundo, a saber, la fuerte dependencia con el recubrimiento de la desorción de CO en Pd(111) y la desorción y oxidación de CO en Ru(0001).

CO Análisis de interacciones moleculares, electrónicas e iónicas con superficies de materiales van der Waals

P. Buitrago [1], H. Betancourt [1], A. Candia [1], S. Rodríguez [1], S. Montoro [1], C. Bonín [1,2], M. Romero [1,2], E. García [1], G. Ruano [3], F. Bonetto [1,2], R. Vidal [1,2] y M. Passeggi [1,2]

[1] Instituto de Física del Litoral (IFIS, CONICET-UNL), Güemes 3450, Santa Fe, Argentina; [2] Dpto. de

Física, Facultad de Ingeniería Química, Santiago del Estero 2829, Santa Fe, Argentina; [3] Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) y Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), San Carlos de Bariloche 8400, Argentina

El Laboratorio de Física de Superficies e Interfaces de Santa Fe se especializa en la caracterización de superficies y materiales 2D utilizando técnicas avanzadas como STM, AFM, AES, EELS, y LEIS, complementadas con diversos tipos de modelado teórico. El grupo investiga los mecanismos de interacción entre moléculas y partículas cargadas con superficies de distintos materiales van der Waals y los subsecuentes cambios en sus propiedades físicas. Esta presentación se enfoca en el disulfuro de molibdeno (MoS_2) y el grafito pirolítico altamente orientado (HOPG). En el caso del MoS_2 , se expone cómo los distintos métodos de preparación de muestras —incluida la exfoliación mecánica en aire, en vacío y el bombardeo iónico— pueden introducir contaminantes que afectan la caracterización del material. Además, desde una perspectiva teórica y experimental, se aborda el proceso de transferencia de carga durante las colisiones de baja energía de Ne^+ con la superficie de MoS_2 , destacando la importancia de los mecanismos de transferencia de carga resonante y la neutralización Auger. En cuanto al HOPG, se analiza su interacción con moléculas de fluoruro de aluminio (AlF_3) evaporadas de forma perpendicular a la superficie, revelando: (i) un proceso de intercalación no reactivo, dominado por la difusión de AlF_3 entre capas a través de bordes escalonados y defectos superficiales, que provoca un aumento del 20 % en el espaciado interplanar del grafito; (ii) la formación de ampollas de AlF_3 ; y (iii) un mecanismo de absorción preferencial influenciado por la rugosidad del sustrato. Estos resultados sugieren que el proceso de intercalado podría potenciar el desarrollo de nuevos dispositivos cuasi-2D y abren el camino para futuras mejoras en el rendimiento de los sistemas de almacenamiento de energía.

co Importancia atómica del Au en la difusión de CO en superficies de Pt: un estudio de DFT.

***Paula S. Cappellari*[1], *Ana Lucía Reviglio*[2], *Germán M. Soldano*[3], *Marcelo M. Mariscal*[3] y *Gabriel A. Planes*[1]**

[1] IITEMA, CONICET, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales, UNRC, Argentina. [2] IITEMA, CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales, UNRC, Argentina. [3] INFIQC, CONICET, Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, UNC, Argentina.

El avance en la conversión y el almacenamiento de energías renovables ofrece una alternativa a los combustibles fósiles, ya que promueve el desarrollo de tecnologías sostenibles y limpias. En este sentido, las celdas de combustible (FC) se posicionan como dispositivos ideales, ya que convierten energía química en eléctrica mediante reacciones electroquímicas con bajo impacto ambiental. El uso de electrocatalizadores en FC es fundamental para su desarrollo. En este sentido los materiales basados en Pt se presentan como sustratos óptimos para tal fin, sobre todo para FC de metanol ó ácido fórmico. Sin embargo se presentan desafíos a sobrellevar en la implementación de catalizadores de Pt, como son su elevado costo y fácil envenenamiento ante especies intermediarias. La combinación de Pt con otros metales, como Au, puede mitigar el envenenamiento por CO y mejorar el rendimiento anódico. La combinación Pt/Au muestra un efecto sinérgico superior al esperado, actuando como una

barrera que impide la difusión superficial del CO.

El estudio que hemos realizado se centra en caracterizar el papel de los átomos de Au en la adsorción y difusión de CO en superficies de Pt no ideales (superficies escalonadas), utilizando cálculos de primeros principios basados en DFT. Los resultados muestran que ciertos caminos para la difusión de CO en las superficies de Pt escalonado requieren activación, mientras que en superficies abiertas la misma es espontánea. Sin embargo, la presencia de Au resulta en barreras de activación prohibitivamente altas, condicionando fuertemente el proceso difusivo. Estos efectos coinciden con resultados experimentales, donde se evidencio una ralentización difusional de CO en superficies de Pt modificadas con ad-átomos de Au. Esta investigación proporciona una comprensión detallada de los efectos sinérgicos observados en superficies de catalizadores bimetálicos, lo que aporta conocimientos que pueden aplicarse al diseño de materiales catalíticos más eficaces.

CO Aptasensor basado en AuNRs@MIL100(Fe)_cisteína con detección impedimétrica de trombina para el diagnóstico temprano del daño cardiovascular

S.V. Piguillem [1], O.J. Furlong [2], M.S. Nazarro [2], M. C. Bernini [3], M.C. Rodríguez [1]

[1] Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba (INFIQC-CONICET) Universidad Nacional de Córdoba, Argentina; [2] Instituto de Física Aplicada (INFAP-CONICET) Universidad Nacional de San Luis, Argentina; [3] Instituto de Investigación en Tecnología Química (INTEQUI-CONICET) Universidad Nacional de San Luis, Argentina.

Dentro de las investigaciones llevadas a cabo post-pandemia por COVID-19 se ha encontrado que una proporción de personas que contrajeron el virus, puede desarrollar una enfermedad trombotica, tanto venosa como arterial, debido a la inflamación excesiva que afecta al sistema vascular y predispone la hipercoagulabilidad. En este contexto, la detección rápida y confiable de biomarcadores de importancia cardíaca como la enzima trombina (T) es crucial para monitorear la salud del paciente. Los biomarcadores reflejan el estado de una enfermedad de manera segura y reproducible y para esto se requieren biosensores sensibles y específicos que permitan detectar tales biomarcadores de manera rápida, portátil y económica. Con este objetivo se realizó un diseño a nivel molecular controlando las interacciones en las interfases de la plataforma biosensora, la cual consta de un aptámero anti-T como elemento de bio-reconocimiento inmovilizado a un composite formado a partir de nanobastones de oro (AuNRs) ensamblados a una red metal-orgánica MIL100(Fe) previamente funcionalizada con cisteína. El composite "AuNRs@MIL100(Fe)_cisteína" fue caracterizado por espectroscopía FTIR, XPS y SEM. Para el armado del biosensor se modificó mediante drop-casting un electrodo de carbono vítreo con una suspensión del composite, luego se inmovilizó el aptámero anti-T y finalmente, se detectó la T, reconocida específicamente por el aptámero. El seguimiento de las etapas de modificaciones del electrodo, así como la detección de la enzima se realizaron mediante impedancia, logrando un límite de detección en el orden de 10^{-12} M de T. Además, los ensayos de interferencia en presencia de biomoléculas como citocromo C, mioglobina y lisozima, mostraron que el aptasensor es específico y selectivo para T. Este dispositivo promete ser capaz de detectar T en muy bajas concentraciones presentes en suero humano, lo cual sería muy útil en instancias tempranas de un fallo cardíaco.

Sesión del Miércoles 6 de Noviembre

PM-1 Modelo de Monte Carlo cinético aplicado a la deposición de platino sobre $Au(111)$

M. C. Gimenez[1], O. A. Oviedo[2] y E. P. M. Leiva[2]

[1] IFEG (CONICET), FaMAF (U.N.C.), Córdoba, Argentina. [2] INFIQC (CONICET), Depto. de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, U. N. C., Córdoba, Argentina.

Antecedentes: En la literatura se ha estudiado experimentalmente el reemplazo galvánico de una monocapa de Cu previamente adsorbida mediante deposición a subpotenciales sobre una superficie de Au(111), por átomos de Pt. Se encontró que cada 4 átomos de Cu que salen, entra uno de Pt. Por lo tanto, a partir de un grado de cubrimiento inicial $\theta_{Cu} = 1$ se obtiene un cubrimiento final $\theta_{Pt} = 0,25$. Eventualmente los adátomos de Pt difunden sobre la superficie, lo que lleva a la formación de islas de este metal sobre la misma.

En el presente trabajo se simuló la electrodeposición acoplada a la difusión de átomos de Pt sobre superficies de Au(111) mediante Monte Carlo cinético para estudiar la deposición electroquímica y la formación espontánea de islas de platino sobre oro. Por un lado, las velocidades de difusión se calcularon empleando la teoría de velocidades absolutas, con parámetros basados en cálculos de EAM. Por otro lado, las velocidades de deposición v_{dep} se consideraron paramétricamente tomando varios valores posibles (emulando diferentes condiciones experimentales).

Este esquema permitió acceder a la evolución temporal y los estados finales de las islas, compatibles con el grado de cubrimiento $\theta_{Pt} = 0,25$, y el efecto de v_{dep} . En todos los casos, se encontró que la morfología de las islas depositadas era más bien ramificada, en lugar de islas compactas. La distribución del tamaño de islas en el estado final es más amplia y tiende a valores más altos para valores más bajos de v_{dep} .

PM-2 Plataformas de óxido de grafeno reducido sin metales nobles para la detección de H_2 a temperatura ambiente en condiciones de alta humedad

D. Smirnoff, H. Romeo, J. Puig y F. Schipani

INTEMA, Argentina

Sensores de óxido de grafeno reducido (rGO), libres de nanopartículas de metales nobles, fueron preparados y probados a temperatura ambiente (21 °C) frente a hidrógeno (H_2) en condiciones de alta humedad (más del 90 % h.r.). El material rGO se obtuvo a través de un sencillo protocolo químico/térmico a partir de óxido de grafeno (GO) como material base, utilizando ácido ascórbico como agente reductor. El grado de reducción del GO se ajustó modificando las condiciones quimio-térmicas, lo que permitió moldear la respuesta sensora. Se demostró que esta última escala con el contenido de carbono sp^2 (C_{sp^2}) de la estructura rGO, que varió de $\sim 40\%$ - C_{sp^2} para la muestra menos reducida a $\sim 70\%$ - C_{sp^2} para el material más reducido. Las mediciones corriente-voltaje revelaron la influencia de la reducción en los mecanismos de conducción electrónica, evidenciando un cambio de un comportamiento altamente no lineal (con una componente característica de un mecanismo de conducción limitado por carga espacial, SCLC) a una respuesta puramente óhmica a medida que avanzaba la reducción del GO. Para evaluar la selectividad de los sensores a la molécula objetivo, también se probaron otros gases oxidantes y reductores distintos de H_2 (CO , CO_2 y NO_2). La muestra más reducida mostró una respuesta superior cuando se expuso a diferentes concentraciones de H_2 en una atmósfera con niveles de humedad por encima del 90 % h.r. En estas condiciones, se logró una sensibilidad cruzada despreciable frente a CO , CO_2 y NO_2 . Para el sensor de mejor rendimiento, los tiempos de respuesta (t_{66}) y recuperación (t_{rec}) se calcularon en 72 y 374 s (a 0.05 % de H_2), respectivamente, con una sensibilidad de 0.7 % y un límite de detección estimado en 2.5 ppm de H_2 .

PM-3 Caracterización de estructuras autoensambladas de 4,4'-bis (4-piridil) terfenilo sobre HOPG: un estudio STM y cálculos de primeros principios

Fernando R. Pantano [1,3], Franco M. Eroles [2,3], Fernando P. Cometto [2,3], Mariana I. Rojas [1,3]

[1] Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Teórica y Computacional, Argentina; [2] Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Físicoquímica, Argentina; [3] Instituto de Investigaciones en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), CONICET, Argentina

Mediante microscopía de efecto túnel (STM) se estudió la adsorción de moléculas de 4,4'-bis (4-piridil) terfenilo (BPTB) autoensambladas sobre grafito pirolítico altamente orientado (HOPG). Cuando la superficie de HOPG se pone en contacto con soluciones diluidas de BPTB en ácido n-nonanoico, se observa la formación de nanohilos de moléculas autoensambladas en bordes de escalones, mientras que a altas concentraciones de BPTB se forman películas completas sobre las terrazas. Las imágenes STM de las películas revelan una combinación de diferentes texturas polimórficas, donde las moléculas con configuraciones planas y curvas se ensamblan principalmente mediante interacciones puente hidrógeno y en los defectos mediante interacciones electrostáticas. Estas estructuras y las propiedades de la interface modificadas se investigaron y validaron mediante simulaciones atomísticas de primeros principios. También se analizaron las interacciones entre moléculas de BPTB y el sustrato de HOPG, teniendo en cuenta las direcciones armchair y zigzag sobre la superficie de grafeno. Además se estudiaron las propiedades eléctricas y ópticas de la heterounión BPTB/grafeno formadas, destacando sus posibles aplicaciones en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos.

PM-4 Películas de MoS₂ como sustrato SERS: optimización de la síntesis y activación con H₂O₂ para la detección de rodamina 6G

Carlos Monzón [1], Karen Navarro [2], Juan De Paoli [1] y Martín Patrino [1]

[1] Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias químicas, Instituto de Investigaciones en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), Universidad Nacional de Córdoba, X5000 Córdoba, Argentina ; [2] Universidad de La Sabana, Chía-Cundinamarca, Colombia

La espectroscopía Raman incrementada por superficie (SERS) basada en materiales no plasmónicos, representa una nueva frontera de estudio debido a su mayor selectividad, estabilidad química, biocompatibilidad y menor costo en comparación con los nanomateriales plasmónicos basados en Au o Ag. Entre estos materiales, el MoS₂ ha ganado especial atención debido a su elevada estabilidad en distintos medios, a su capacidad para adsorber moléculas y suprimir su fluorescencia. Aunque el incremento intrínseco SERS del MoS₂ es relativamente bajo en comparación con los nanomateriales plasmónicos, mediante ingeniería de defectos es posible optimizar su actividad. En 2014, se reportó por primera vez que, al someter películas delgadas de MoS₂ a tratamientos con plasma de argón u oxígeno, se incrementó significativamente la intensidad de las señales Raman de la Rodamina 6G (R6G). Desde entonces, se han explorado diversas estrategias para optimizar la actividad SERS de estos sustratos. Sin embargo, la mayoría de los estudios se han enfocado en modificar el MoS₂ una vez sintetizado, o utilizando métodos de síntesis que carecen de control preciso sobre el espesor y uniformidad a gran escala. En este trabajo, se sintetizaron películas de MoS₂ mediante la sulfurización de películas de Mo de 1, 5 y 10 nm sobre sustratos de SiO₂/Si a 700°C, y se evaluaron sus propiedades como sustrato SERS utilizando R6G como sonda Raman. Posteriormente, las películas de mejor desempeño se sometieron a un tratamiento con H₂O₂ diluido para evaluar su efecto en la actividad SERS. Los resultados indicaron que los espesores más delgados presentaron una mejor actividad como sustrato SERS, y que existe un tiempo óptimo de inmersión en H₂O₂ que maximiza la intensidad de la R6G. Nuestro trabajo demuestra que es posible optimizar el rendimiento de sustratos no plasmónicos para la detección de moléculas mediante SERS, utilizando parámetros sintéticos y modificaciones simples, con resultados prometedores.

PM-5 Respuesta de la ley de potencia en sensores nanoestructurados de dióxido de estaño y su dependencia de la presión parcial de oxígeno

D. A Mirabella, C. Buono y C. M. Aldao

Instituto de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (ICYTE) Universidad Nacional de Mar del Plata y Consejo Nacional de Investigaciones y Tecnológicas (CONICET) Juan B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata, Argentina.

La adsorción de oxígeno juega un papel clave en la determinación de la resistividad de las películas de SnO₂ y es el mecanismo básico involucrado en la detección de gases. Regularmente se encuentra que la resistencia eléctrica (R) de las películas semiconductoras de los óxidos metálicos tipo n obedece una ley de potencias con la presión de oxígeno como $R \propto p^\gamma$ (donde p es la presión parcial de oxígeno).

Dicha ley de potencias se puede derivar mediante la ley de acción de masas aplicada a reacciones propuestas en la superficie del semiconductor y se encuentra que el valor γ depende de las especies de oxígeno ionosorbidas. Por lo tanto, se espera que $\gamma = 1/2$ para oxígeno O^- quimisorbido con carga única y $\gamma = 1/4$ para oxígeno O^{2-} quimisorbido con doble carga. Sin embargo, experimentos recientes han demostrado que el exponente los valores de γ son diferentes para presiones parciales de oxígeno altas y bajas. En este trabajo, presentamos un modelo teórico que tiene en cuenta la coexistencia de oxígeno simple y doblemente cargado y que explica por qué el exponente γ cambia conforme la presión parcial de oxígeno crece.

PM-6 Enriquecimiento superficial y propiedades de monómeros de rutenio(II) anfílicos en líquidos iónicos

Luciano Sanchez Merlinsky [1], Daniel Hemmeter [2], Luis M. Baraldo [1], Florian Maier [2], Hans-Peter Steinrück [2] y Federico J. Williams [1].

[1] INQUIMAE - DQIAQF, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. II, Piso 3, C1428EHA, Buenos Aires, Argentina; [2] Lehrstuhl für Physikalische Chemie II, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Egerlandstrasse 3, Erlangen, Germany.

Recientemente se ha demostrado que la longitud de las cadenas alquílicas (Cn) del anillo de imidazolio (Im) en líquidos iónicos con cationes $[CnC1Im]^+$, con $n = 1 - 16$, influye sobre la composición de la superficie y determina un enriquecimiento superficial de los mismos. Los reportes muestran que el enriquecimiento de las cadenas alquílicas en la capa más externa del líquido ocurre junto a la depleción del anillo de imidazolio y de los aniones del líquido iónico, efecto que se vuelve más pronunciado a medida que aumenta la longitud de la cadena carbonada. Por otro lado, también se ha observado un enriquecimiento superficial en complejos de Pt con sustituyentes perfluorados.

En este trabajo, se sintetizó y estudió la serie de complejos $Na_4[Ru(4,4'\text{-dicarboxilato-bpy})_2(L)](PF_6)_2$ (bpy = 2,2'-bipiridina y L = 4,4'-dimetil-bpy, 4,4'-dinonil-bpy, 4,4'-dietoxy-bpy y 4,4'-diterbutil-bpy) y $[Ru(bpy)_2(4,4'\text{-dinonil-bpy})](PF_6)_2$ conteniendo cadenas alquílicas de distintas longitudes y formas para investigar el enriquecimiento superficial en la interfase líquido/vacío del líquido iónico de acetato de 1-etil-3-metilimidazolio mediante XPS resuelto en el ángulo. La introducción de carboxilatos en las bipyridinas genera una región altamente polar en los complejos, de modo de mejorar su solubilidad en el líquido iónico, dando lugar a estructuras marcadamente anfílicas que podrían actuar como surfactantes.

El análisis de las señales de RMN de los complejos sintetizados permitió corroborar sus estructuras químicas. Las medidas de XPS a 0° y 80° respecto a la normal de la superficie han demostrado que la funcionalización de estos complejos con cadenas alquílicas hidrofóbicas de 9 átomos de carbono conduce a un enriquecimiento superficial en la interfase líquido/vacío, observándose una concentración hasta 100 veces superior respecto al valor esperado para una distribución homogénea del mismo. De esta forma, las cadenas alquílicas se orientan en dirección a la interfase, ubicando a estos complejos en la capa más superficial del líquido y reduciendo la tensión superficial. La funcionalización con grupos no polares más pequeños muestra que poseer una región hidrofóbica no es suficiente para promover la acumulación del complejo en la superficie del líquido iónico o reducir la tensión

superficial del mismo.

Ref: Sanchez Merlinsky, L.; Hemmeter, D.; Baraldo, L. M.; Maier, F.; Steinrück, H. P.; Williams, F. J. Unlocking the Fluorine-Free Buoy Effect: Surface-Enriched Ruthenium Polypyridine Complexes in Ionic Liquids. ChemistryOpen 2024. <https://doi.org/10.1002/open.202400092>.

PM-7 Adsorción y Difusión de un Átomo de Plata sobre superficies de Oro

Gabriela Grad [1], Cecilia Gimenez [1,2], Edgardo Bonzi [1]

[1] FaMAF y Computación, Argentina, [2] CONICET, Argentina

Estudiamos la adsorción y difusión de átomos de plata sobre la superficie (001) de oro, empleando cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) y la aproximación de gradiente generalizada (GGA) en su versión Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Este enfoque ha demostrado su capacidad para predecir con precisión las propiedades energéticas totales. Inicialmente, se analizaron las propiedades estructurales de las orientaciones (001), (110) y (111) del oro. Posteriormente, se examinó el comportamiento de adsorción de átomos de plata en la superficie (001) del oro, evaluando las energías de adsorción en diversos sitios como hollow, bridge y top. Este análisis permitió identificar los sitios de adsorción más favorables. Además, se calcularon las velocidades de difusión para comprender el movimiento de los átomos de plata sobre la superficie. Se investigó la difusión del átomo de plata desde su sitio de adsorción más estable a los sitios vecinos, determinando barreras y velocidades de difusión mediante el método de banda elástica Nudged (NEB).

PM-8 Exploración del uso del grafeno pristino y con vacancias, en la adsorción de contaminantes para purificación del biogás y agua mediante la Teoría del Funcional de la Densidad

Claudio L. Oviedo [1], Jenny Gómez Avila [1,2], Gabriela Grad [1], Edgardo Bonzi [1]

[1] FaMAF y Computación, Argentina, [2] CONICET, Argentina

La necesidad de un cambio sustentable en Argentina impulsa el estudio de nuevas fuentes de energía y la gestión de recursos hídricos, reduciendo la dependencia de hidrocarburos y la contaminación del agua. Este trabajo aplica técnicas avanzadas de adsorción y difusión, previamente utilizadas en estudios de adsorción de átomos metálicos, para abordar la purificación de biogás y la eliminación de arsénico en agua, utilizando como absorbente el grafeno pristino y con vacancias.

En el caso del biogás, compuesto principalmente de metano y dióxido de carbono, es esencial eliminar contaminantes tales como el ácido sulfhídrico. Estas impurezas afectan negativamente los equipos de procesamiento y generan emisiones contaminantes. Utilizando cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) y la aproximación de gradiente generalizada (GGA), se determinan los sitios más favorables para la adsorción de estos contaminantes, optimizando su eliminación y

mejorando la eficiencia del biogás como fuente de energía renovable. De manera similar, la eliminación de arsénico en agua, tanto en sus formas (III) como (V), es crucial para la salud pública y el medio ambiente. Aplicando técnicas de adsorción y difusión, se pueden identificar y optimizar los procesos necesarios para reducir los niveles de arsénico a límites seguros. Estas metodologías no solo protegen la salud humana y los ecosistemas acuáticos, sino que también aseguran la sostenibilidad y seguridad de los recursos hídricos. Ambos estudios destacan la importancia de aplicar técnicas avanzadas de adsorción y difusión para la purificación de recursos energéticos y ambientales, promoviendo un futuro más sostenible y saludable.

PM-9 Adsorbentes para tratamiento de aguas basados en derivados de biomasa, residuos y contaminantes

L. M. Saleh Medina [1][2], V. Castro [1], B. Aráoz [3], R. M. Negri [1][2]

[1] Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – Universidad de Buenos Aires, Argentina [2] Laboratorio de Materiales Compuestos y Energía (LAMCE) – INQUIMAE – CONICET – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – Universidad de Buenos Aires, Argentina [3] ITECA, Universidad Nacional de San Martín-CONICET, Buenos Aires, Argentina

La contaminación del agua es un gran problema a nivel local como global. La adsorción de colorantes y metales pesados emerge como una solución atractiva debido a sus bajos costos comparativos y la posibilidad de recuperar los contaminantes para ser reutilizados. El quitosano, con sus grupos NH₂ y OH puede complejar iones metálicos, los cuales estabilizan su estructura en agua. Con el fin de mejorar la adsorción y las propiedades mecánicas se pueden emplear extractos de cáscaras de cítricos, que proveen mayor cantidad de grupos funcionales y especies plastificantes.

Se prepararon membranas de quitosano (CS), con extracto de cáscaras de limón (CSL) o con cobre (II) (CS-Cu) por evaporación de solvente para la adsorción de colorantes. Comparativamente, CSL mostró un aumento en el porcentaje de adsorción de cristal violeta (CV) de 14 a 26 % a pH 9 mientras que la adsorción de naranja de metilo (NM) disminuyó del 89 al 75 % a pH 7. A su vez, el módulo elástico se redujo de 1719 MPa para CS a 1020 MPa para CSL. Para CS-Cu, la adsorción de CV fue de 17 % a pH 9 mientras que la de NM no mostró diferencias significativas a pH 7 respecto de CS. Se observó que la adsorción de CV (pKa 9.4) aumenta mientras que la de NM (pKa 3.4) disminuye al incrementarse el pH de punto de carga cero. Esto sugiere que el mecanismo principal de adsorción para CV es de interacciones dispersivas/dipolo-dipolo mientras que para NDM es electrostático.

NM pudo ser desorbido por inmersión en NaOH 1M pero no CV por ser degradable en este medio. Tampoco fue posible desorber CV en etanol.

También se estudió la adsorción de Cu(II) sobre CS y CSL. Luego de 24 hs, la adsorción de Cu(II) sobre CS fue de 573 mg/g mientras que sobre CSL fue de 1611 mg/g. Cu(II) se recuperó sumergiendo las membranas en EDTA 0.05M a pH7 durante al menos 5 ciclos.

En conclusión, se han desarrollado membranas 100 % derivadas de residuos y contaminantes con propiedades elásticas y de adsorción mejoradas para la remoción de colorantes.

PM-10 Adsorción mejorada de etileno mediante el biocompuesto zeolita/PLA

J. Alejandro Ávila Ramírez [1], M. Sergio Moreno [2], Cristian M. Piqueras [3] y Andrea M. Pereyra[4,5]

[1] LIQMA, ITBA, Iguazú 341, Buenos Aires, Argentina; [2] INN, CNEA-CONICET-CAB, San Carlos de Bariloche, Argentina; [3] PLAPIQUI, UNS-CONICET, Bahía Blanca, Argentina; [4] CITEMA, UTNFRLP-CIC, La Plata, Argentina; [5] CINDECA, CONICET-UNLP-CIC, La Plata, Argentina

La senescencia de los productos frutihortícolas inducida por el C₂H₄ es uno de los principales problemas de la industria agroalimentaria. Su reducción es crucial para prolongar la vida útil y evitar desperdicios. Por ello, los envases activos están cada vez más difundidos a nivel global.

En este trabajo, se sintetizó un biocompuesto constituido por una matriz polimérica de ácido poliláctico (PLA) y zeolita A con cationes Ag⁺, Zn²⁺ y NH₄⁺ en sus posiciones de intercambio con el fin de proveer propiedades biocidas y secuestrantes de etileno. La zeolita se integró al PLA mediante moldeo por evaporación de solvente para investigar el comportamiento del biocompuesto frente al C₂H₄.

Los resultados de microscopía electrónica de alta resolución (HRTEM) y microscopía electrónica de barrido y de haz de iones enfocado (SEM, FIB-SEM) mostraron que en el proceso de moldeo se generaron nanopartículas. Se infiere que el cloroformo utilizado como solvente indujo la migración de Ag⁺ hacia la superficie externa de los cristales zeolíticos. Las nanopartículas se identificaron por HRTEM, concluyendo que mayoritariamente correspondían a óxidos de Ag. Se observó una interacción repulsiva entre el polímero y los cristales, que se evidenció por la presencia de interfases definidas. Los estudios de adsorción de C₂H₄ en zeolita y Ag⁺Zn²⁺-zeolita mostraron que el mecanismo adsorptivo es principalmente fisorción, y con la incorporación de Ag⁺ y Zn²⁺, la quimisorción representa el 40 % aproximadamente. Luego de la incorporación al PLA y la formación de nanopartículas, el mecanismo dominante es quimisorción, probablemente por la disminución del área expuesta de la zeolita y la poca interacción de los óxidos con el polímero. El adsorbato interactúa directamente con las nanopartículas a través de la formación de complejos π .

Este estudio sugiere que el biocompuesto obtenido mejoró la interacción con el C₂H₄, proporcionando una información valiosa para la ingeniería de envasado de productos climatéricos.

PM-11 Adsorción de un colorante reactivo: estudio de la cinética y la termodinámica

María L. Ruiz [1,2], María C. Cangiano[2], Nora A. Comelli[1,2], María del V. Ponce[2,3], María C. Avila[1,2]

[1]INTEQUI-CONICET. Campus Universitario. Ruta Prov. N° 55. Extremo Norte. Villa Mercedes (S.L.) Argentina [2] FICA-UNSL. Campus Universitario. Ruta Prov. N° 55. Extremo Norte. Villa Mercedes (S.L.) Argentina [3] INFAP-CONICET- UNSL. Avenida Ejército de los Andes 950. San Luis. Argentina.

Los colorantes orgánicos, especialmente los azoicos, como el naranja reactobond (NR16), son difíciles de biodegradar y plantean serios problemas para los ecosistemas acuáticos y terrestres. Las industrias textiles son una de las principales fuentes de contaminación debido a los procesos de tinción que im-

plican el uso de grandes cantidades de colorantes. Se han propuesto diversos métodos de tratamiento de las aguas contaminadas, como la coagulación-floculación, la oxidación avanzada, tecnología de membranas y, adsorción, siendo esta última una solución eficiente y económica. Para que la adsorción cumpla con este objetivo se requiere un adsorbente competitivo. Los sólidos tipo hidrotalcita como los hidróxidos dobles laminares (HDL), han demostrado ser efectivos en la adsorción de colorantes aniónicos como el NR16, debido a su capacidad de intercambio iónico y alta superficie específica.

El HDL fue caracterizado para interpretar su comportamiento fisicoquímico y correlacionarlo con su desempeño frente al NR16. Las variables que afectan al sistema, como la temperatura, el tiempo de contacto y las concentraciones tanto del NR16 como del HDL fueron estudiadas para determinar la cinética y la termodinámica del proceso.

Se usaron dos modelos cinéticos, el de Lagergren y, el de Ho y McKay. Según los altos valores del coeficiente de correlación (R^2), puede estimarse que el modelo de Pseudo segundo orden es el más adecuado para interpretar los resultados obtenidos.

La evolución de la adsorción se muestra influenciado por la temperatura. Cuando esta aumenta la capacidad de adsorción disminuye indicando un proceso exotérmico tal como evidencia el valor de ΔH° obtenido. El ΔG° para temperaturas bajas sugiere un progreso de la adsorción favorable, que a medida que aumenta la temperatura, la remoción disminuye. El valor de ΔS° negativo confirma este comportamiento ordenado que desfavorece la decoloración de la solución.

PM-12 Compósito a partir de cáscara de maní capaz de adsorber Co^{+2}

Agustina Gallinares[1], Maria Laura Para[2], Jorge Andres Donadelli[2], Fabio Saccone[2], Melina Cozzarin[1,2]

[1] Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Calle 115 y 47, La Plata, Buenos Aires, Argentina.; [2] YPF-Tecnología (Y-TEC), Av. del Petróleo Argentino 900-1198, Berisso, Buenos Aires, Argentina.

Uno de los materiales catódicos más difundidos en la fabricación de las baterías de litio, es el compuesto conocido como NMC ($\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_{1-x-y}\text{O}_2$). Esta industria genera residuos de Co, Ni y Mn que deben ser tratados, para lo cual, resulta necesario estudiar estrategias que permitan extraer estos metales del ambiente. Los biocarbonos (BC) son materiales capaces de remover contaminantes orgánicos y metales pesados de diferentes medios que pueden sintetizarse mediante pirolisis de biomateriales. Las cortezas vegetales y cáscaras de ciertos frutos poseen una estructura adecuada para la producción de BC debido al alto contenido de lignina o microestructura.

En este trabajo se utilizó cáscara de maní (CM), que se trató térmica y químicamente para funcionalizar y activar su superficie. El tratamiento químico se realizó con KOH y urea para producir un compósito BC-C₃N₄ con una alta proporción de grupos funcionales con O y N, aumentando, además, el área superficial y el volumen del poro. Esto favorece la interacción entre los cationes metálicos y los BC. El objetivo de este trabajo fue estudiar la interacción entre los BC de CM modificados y el Co^{+2} en solución acuosa.

Las CM fueron sometidas a tratamientos térmicos y químicos para generar los BC modificados con C₃N₄. Las pruebas de adsorción de Co^{+2} se realizaron en batch. Se caracterizaron los materiales y soluciones pre y post adsorción de Co^{2+} mediante SEM, EDS, XPS. FTIR-ATR, UV-Vis y ICP-OES.

Se observó que los BC mantienen la estructura porosa de la CM y el C₃N₄ se deposita en la superficie

del BC. Se encontró que la capacidad de adsorción de los biocarbonos mejora radicalmente con el depósito de C₃N₄, alcanzando una retención del 99 % del metal en solución. Se concluyó que el Co+2 interactúa preferentemente con los grupos aromáticos del biocarbono y del C₃N₄. Los materiales obtenidos son de gran interés para el desarrollo de nuevas estrategias para remover metales pesados de aguas contaminadas.

PM-13 Crecimiento de películas delgadas de AlF₃ sobre HOPG mediante Espectroscopía de Electrones Auger (AES)

H. S. Betancourt, S. Montoro [1], A. E. Candia¹, S.J. Rodriguez [1], M.C.G. Passeggi(h) [1], R. Vidal [1], F. Bonetto [1] y G. Ruano [2]

[1] Instituto de Física del Litoral (Conicet-UNL), Santa Fe, Argentina; [2] Centro Atómico Bariloche (CNEA) and Conicet, S.C. de Bariloche, Argentina.

Este estudio investiga el crecimiento de películas delgadas de AlF₃ en sustratos de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) utilizando espectroscopía de electrones Auger (AES). Se emplean dos tipos de HOPG: Grado 2 y Grado 3, que difieren en su ordenamiento cristalino. El Grado 2 muestra un ángulo de dispersión de mosaico de $0,8^\circ \pm 0,2^\circ$ y un tamaño de grano lateral de hasta 1 mm, mientras que el Grado 3 presenta un ángulo de $3,5^\circ \pm 1,5^\circ$ y un tamaño de grano máximo de 30 – 40 nm, siendo estructuralmente menos ordenado. Los análisis AES revelan un mecanismo de sorción en dos etapas distintas. La primera etapa involucra la absorción, donde las moléculas de AlF₃ se intercalan en la superficie del HOPG, causando una atenuación gradual de la señal C KLL. La segunda etapa consiste en la adsorción superficial, caracterizada por cambios abruptos en las señales AES y una disminución repentina de la intensidad de la señal C KLL. Durante esta fase, el haz de electrones primario interactúa directamente con el AlF₃ adsorbido, provocando variaciones en las señales F KLL y Al LMM (oxidado), lo que indica una radiólisis marginal. El estudio explora dos regímenes de evaporación distintos. En el régimen termodinámico, asociado a bajos flujos de evaporación, el proceso de sorción sigue las dos etapas mencionadas. En contraste, el régimen cinético, que ocurre con altos flujos de evaporación, resulta en un crecimiento espontáneo de una capa gruesa. Los defectos en el sustrato juegan un papel crucial, evidenciado por las variaciones significativas en los tiempos de evaporación entre muestras, lo que sugiere que los defectos y bordes de grano facilitan la intercalación.

Los resultados obtenidos mediante AES concuerdan con estudios previos que utilizan técnicas como XPS, STM y RBS, respaldando la hipótesis de un proceso de sorción escalonado. Para profundizar en la comprensión de estos fenómenos, se están llevando a cabo cálculos de la teoría del funcional de la densidad (DFT) y nudged elastic band (NEB). Estos cálculos analizan la trayectoria de mínima energía (MEP) utilizando el método de cadena de estados. El proceso implica la construcción de una estructura de grafito en disposición ABA, sobre la cual se coloca una molécula de AlF₃ para estudiar su difusión en diferentes direcciones. Este análisis proporciona conocimientos sobre las transformaciones moleculares, la energía de difusión e intercalación del AlF₃ en la estructura de grafito, y las barreras energéticas asociadas. Los hallazgos subrayan la importancia de la radiólisis inducida por electrones y las transiciones entre diferentes regímenes de sorción.

PM-14 Modificación superficial de esponjas de polidimetilsiloxano para la adsorción de iones contaminantes en aguas

C. Rodríguez [1], C. Liu [1], Y. S. Minaberry [1], L. M. Saleh Medina [1][2]

[1] Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – Universidad de Buenos Aires, Argentina [2] Laboratorio de Materiales Compuestos y Energía (LAMCE) – INQUIMAE – CONICET – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – Universidad de Buenos Aires, Argentina

El tratamiento de aguas contaminadas es esencial debido a la creciente demanda y baja disponibilidad de fuentes de agua potable. La remoción por adsorción de contaminantes es una de las técnicas más promisorias debido a sus relativos bajos costos, posibilidad de aplicar tanto en sistemas industriales y domésticos y posibilidad de recuperación de las sustancias contaminantes. Los materiales adsorbentes idealmente deben ser resistentes mecánica y químicamente, reutilizables y no generar desechos tóxicos.

Se obtuvieron esponjas de polidimetilsiloxano (PDMS) a partir de emulsiones de PDMS base, entrecruzante, tetrahidrofurano y agua. El tamaño de los poros determinados por SEM estuvo en el rango 100 – 500 μm . El ángulo de contacto de una gota de agua fue de $(100 \pm 10)^\circ$. PDMS no modificada absorbe tolueno, hexano y cloroformo en 114, 217 y 352 % m/m. Durante al menos cinco ciclos de absorción-desorción no se observaron cambios apreciables ni en el porcentaje absorbido ni en la estructura de la esponja. Las capacidades de absorción de soluciones acuosas fueron menores al 10 % m/m. Se estudió la adsorción de Red Oil O, colorante oleofílico. El porcentaje de adsorción fue de 16 % en menos de 10 minutos y alcanzó un 30 % en 24 hs. Con el fin de aportar hidrofiliidad, PDMS fue primero activada mediante inmersión en $\text{H}_2\text{O}_2/\text{NaClO}$ y luego en KOH/N -[3-(trimetoxisilil)propil]etilenediamina (AAPTES). Mediante SEM se observó que luego del tratamiento con $\text{H}_2\text{O}_2/\text{NaClO}$ se forman estructuras de aspecto cristalino alrededor de los poros mientras que al tratar con KOH/AAPTES se genera otro entramado de poros más pequeños (20 – 100 μm). Se estudió la adsorción de $\text{Cu}(\text{II})$ en agua sobre PDMS modificada. Luego de 24 hs la capacidad de adsorción fue de 12 mg/g a pH 5,6. Además, la adsorción de $\text{Cu}(\text{II})$ en mezclas agua/etanol se triplicó para PDMS modificada con respecto a PDMS sin modificar. Finalmente, el porcentaje de absorción de solventes en las esponjas modificadas no cambió significativamente respecto de los obtenidos para las esponjas sin modificar.

Como conclusión, las esponjas de PDMS modificadas son buenas candidatas para la remoción simultánea de compuestos hidrofílicos y oleofílicos.

PM-15 Comparación de la eficiencia catalítica de platino sobre magnetita: átomo individual vs nanopartículas

M. Laviani [1], G. Benítez [1], F. Cometto [2], C. Heske [3,4,5], L. Weinhardt [3,4,5], D. Hauschild [3,4,5] y D. Grumelli [1]

[1] INIFTA, Universidad Nacional de La Plata. La Plata, Buenos Aires, Argentina; [2] INFIQC, Universi-

dad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina; [3] IPS, Karlsruhe Institute of Technology. Karlsruhe, Germany; [4] ITCP, Karlsruhe Institute of Technology. Karlsruhe, Germany; [5] Department of Chemistry and Biochemistry, University of Nevada. Las Vegas, USA

Las reacciones electroquímicas basadas en moléculas atmosféricas, como la reacción de reducción de oxígeno (ORR, Oxygen Reduction Reaction), son soluciones prometedoras para la demanda de energía y el deterioro ambiental [1]. Sin embargo, requieren catalizadores costosos para acelerar el proceso. Los catalizadores de átomos individuales (SAC, Single Atom Catalysts) surgieron por ser más eficientes y económicos. Se basan en la inmovilización de átomos metálicos individuales sobre soportes con baja o nula actividad catalítica. No obstante, reducir el tamaño del catalizador puede afectar su estabilidad termodinámica. Por lo que se utilizan sustratos que estabilizan los SACs, como las superficies monocristalinas de magnetita (Fe_3O_4), que, preparadas en condiciones de ultra alto vacío, mantienen una reconstrucción superficial estable para los SACs [2] aún bajo condiciones electroquímicas [3].

El objetivo de este proyecto es estudiar la respuesta electrocatalítica de Pt-SACs para la ORR en un medio alcalino saturado con oxígeno. Se depositaron Pt-SACs sobre la superficie reconstruida de Fe_3O_4 (001) mediante deposición en fase vapor y se compararon con nanopartículas de Pt de 200 nm de tamaño que se depositaron sobre Fe_3O_4 mono- y policristalina a partir de una dispersión. La presencia, cobertura y naturaleza química del Pt se verificaron mediante espectrometría de fotoelectrones emitidos por rayos X y las propiedades cristalográficas de la superficie se analizaron con difracción de electrones de baja energía.

Los resultados preliminares confirman la presencia del metal antes y después de la reacción ORR para las deposiciones de Pt-SACs y Pt-NPs. Tanto la superficie funcionalizada con nanopartículas como con átomos individuales mostró una mejora significativa en la actividad catalítica para esta reacción.

Referencias

- [1] Seh, Z.W., Science, 2017, 355, eaad4998.
- [2] Bliem, R., Science, 2014, 346 (6214), 1215-1218.
- [3] Grumelli, D., Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 21904.

PM-16 Porfirinas metálicas inmovilizadas sobre magnetita: Catalizadores de átomos individuales para la reacción de reducción de oxígeno

Romina M. A. Heredia [1], Guillermo Benitez [1], Juan Giussi [2], C. Heske [3], [4], [5], L. Weinhardt [3], [4], [5], Dirk Hauschild [3], [4], [5], y Doris Grumelli [1]

[1] INIFTA - Universidad Nacional de La Plata - CONICET. La Plata, Buenos Aires, Argentina; [2] YTEC. YPF TECNOLOGIA. La Plata, Buenos Aires, Argentina; [3] IPS. Karlsruhe Institute of Technology. Karlsruhe, Germany; [4] ITCP. Karlsruhe Institute of Technology. Karlsruhe, Germany; [5] Department of Chemistry and Biochemistry, University of Nevada, Las Vegas, USA

La mejora en las velocidades y eficiencias de las reacciones electrocatalíticas es clave para desarrollar las tecnologías de conversión de energía y producción de combustibles[1]. La reacción de reducción de oxígeno (ORR), crucial en las pilas de combustible, utiliza Pt como catalizador, un material costoso.

Las alternativas incluyen metales de transición como Fe, Co, Ni, etc. Las porfirinas metálicas son de gran interés como sustitutos de los catalizadores actuales, adecuadas para la funcionalización de superficies a nanoescala comportándose como catalizadores de un sólo átomo (SACs).

Este trabajo explora el uso de superficies monocristalinas y policristalinas de Fe₃O₄, material con alta abundancia natural, modificado con porfirinas de Co y Ni (CoTPP, CoTPP4N₂⁺, NiTPP y NiTPP4N₂⁺) como materiales de electrodo para mejorar la catálisis de la ORR. Se emplearon dos métodos de inmovilización diferentes: evaporación en fase vapor, en condiciones de ultra alto vacío (UHV) y electrografting, en solución. Las muestras se caracterizaron por espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS) y se evaluó la respuesta electrocatalítica en medio alcalino.

Los espectros de XPS de CoTPP/ Fe₃O₄ (001) muestran señal en la región de N1s, pero no así en la de Co2p. El análisis del espectro de alta resolución de N1s confirma la presencia de porfirinas, habiendo moléculas metaladas y no metaladas. La ausencia de Co puede deberse a su incorporación en los sitios de las vacancias catiónicas subsuperficiales de Fe₃O₄ (001) reconstruida [2]. Este sistema exhibe una actividad electrocatalítica hacia la ORR comparable a Fe₃O₄ (001). En contraste, los sistemas preparados por electrografting, tanto sobre muestras monocristalinas como policristalinas de Fe₃O₄ muestran señales claras de XPS para N1s, Co2p y Ni2p, y evidencian mejoras en la actividad electrocatalítica.

Referencias

[1] Hötger, D., *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2019, 21, 2587-2594.

[2] Bliem, R., *Science*, 2014, 346(6214), 1215-1218.

PM-17 Estudio del intercambio de ligandos de la superficie de nanopartículas de Ag para la transferencia de fase a solventes orgánicos

Francisco Aldana [1], Eugenia Zelaya [1], y Julio Azcárate [1]

[1] Física de Metales, Centro Atómico Bariloche (CAB), Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) - CONICET, Av. Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina

Las nanopartículas de Ag (AgNPs) han despertado un gran interés debido a sus propiedades ópticas. Según el tamaño y la forma de dichas partículas es posible excitar los plasmones superficiales localizados (LSPs) mediante la interacción con luz en el rango del visible hasta el infrarrojo cercano. En la literatura se reportan diversas pruebas de concepto que exploran aplicaciones potenciales, como sensores o catalizadores, aprovechando sus propiedades plasmónicas. No obstante, en muchos casos estas partículas son estudiadas sin una purificación adecuada o sin aislarlas del medio de reacción. Asimismo, para avanzar hacia aplicaciones reales, e incluso a escala industrial, es fundamental poder soportar dichas AgNPs sobre distintos sustratos, preservando sus propiedades ópticas, evitando su agregación y permitiendo muchos ciclos de uso. La decoración del sustrato con estas nanopartículas permite, a su vez, potenciar ciertas características gracias a los efectos sinérgicos entre las AgNPs y el material de soporte.

Como primer paso en esta dirección, es necesario avanzar con la purificación y la transferencia de fase de agua a un solvente orgánico de baja polaridad. Para ello, se desarrolló una estrategia simple y versátil que permite la refuncionalización de la superficie de las AgNPs mediante el intercambio de

ligandos o agentes protectores. Las AgNPs en fase acuosa se encuentran inicialmente estabilizadas por aniones citrato que permiten un control de su geometría. Se ensayó el intercambio del citrato por oleilamina o ácido oleico para transferir las AgNPs a solventes de baja polaridad, como tolueno, hexano, cloroformo y acetato de etilo. En este trabajo se discuten los resultados obtenidos en cada caso, y se analizan los mismos en función de las energías de adsorción, estabilidad y concentración de especies en función del pH.

PM-18 Estudio teórico de las propiedades electrónicas de nanohíbridos Au-Grafeno

Ventre Josefina [1], Ricardo Faccio [2], Francisco Ibañez [1]

[1] Instituto de Investigaciones Físicoquímicas, Teóricas y Aplicadas (INIFTA), UNLP – CONICET, Argentina.

[2] Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química. Universidad de la República. Uruguay.

En los últimos años, la investigación sobre nanomateriales híbridos basados en grafeno ha cobrado gran relevancia debido a sus sobresalientes propiedades ópticas, electrónicas y catalíticas. Se ha demostrado que el ensamblaje de materiales basados en oro (Au) y carbono (C) mejora notablemente su desempeño en aplicaciones como la optoelectrónica, los biosensores y el sensado de moléculas, como la glucosa, entre otras.¹⁻³ En estudios previos demostramos que la mezcla de H₂AuCl₄ con puntos cuánticos de grafeno (GQDs) a temperatura ambiente y pH 6-7 lleva a la formación espontánea de nanohíbridos (NHs) metal-grafeno del tipo carozo-coraza (core-shell), los cuales han mostrado ser activos frente a la oxidación de glucosa. Con el fin de comprender mejor la interacción del NH con la glucosa, en el presente trabajo se presentan estudios teóricos de las propiedades electrónicas de un modelo simplificado. Se modeló un sistema comprendido de una superficie de Au(111) en interacción con una monocapa de grafeno prístino colocada encima, formando una superred (3x3)-R30°, es decir, con una periodicidad (3x3) con el grafeno rotado 30° respecto a la superficie del Au. Esta geometría ha sido identificada previamente como la de menor discrepancia en el parámetro de la celda cristalina.⁴ Posteriormente, se adsorbió una molécula de glucosa con estructura de tipo anillo sobre la superficie. Luego, utilizando simulaciones ab initio mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT) y el programa VASP (Vienna ab initio Simulation Package), se realizaron cálculos de dinámica molecular ab initio (AIMD) y de estructura electrónica. A través de los análisis de densidad de estados, mapas de densidad de carga, función trabajo y energías involucradas, se comenzó a desentrañar la naturaleza de la interacción entre la superficie de Au y el grafeno, así como el impacto de la monocapa de grafeno en la interacción catalítica con la glucosa.

Referencias

(1) Ruiyi, et al. *Sensors and Actuators B: Chemical* 2015, 208, 421-428.

(2) Darabdhara et al. *Advances in Colloid and Interface Science* 2019, 271, 101991.

(3) Luo et al. *Chemical Physics Letters* 2015, 641, 29-32.

(4) Yortanlı et al. *The Journal of Chemical Physics* 2019, 151 (21), 214701.

PM-19 Estrategias post-síntesis para incrementar la capacidad de adsorción de CO₂ en sílices mesoporosas MCM-41

Guillermo D. Aquino [1,2], Cristian M. Piqueras [3], M. Sergio Moreno [4], Germán P. Benedictto [1,2] y Andrea M. Pereyra [1,5]

[1] CINDECA, CONICET-UNLP-CIC, La Plata 1900, Argentina; [2] UTN-FRA, Avellaneda, Argentina; [3] PLAPIQUI, UNS-CONICET, Bahía Blanca 8000, Argentina; [4] INN, CNEA-CONICET-CAB, San Carlos de Bariloche 8402, Argentina; [5] CITEMA, UTNFRP-CIC, La Plata 1900, Argentina

La incorporación de aminas en la superficie de sílices mesoporosas permite incrementar significativamente la capacidad de adsorción de CO₂. Sin embargo, su anclaje efectivo depende de la disponibilidad de grupos silanol que actúen como sitio activo para la condensación del alquil alcoxisilano. Para estas sílices, el problema radica en las condiciones de tratamiento térmico para la eliminación del agente plantilla, que podrían conducir a transformar los grupos silanol en siloxanos no reactivos.

En este trabajo se investigó la influencia de los tratamientos térmicos, realizados a diferentes temperaturas, velocidades de calentamiento y duración, sobre la capacidad de funcionalización superficial de la MCM-41 con grupos 3-aminopropil con el objetivo de incrementar la adsorción de CO₂. El APTS (3-aminopropiltrimetoxisilano) se incorporó a través de la metodología de wet-grafting, y la retención y estabilidad del CO₂ adsorbido fue analizada mediante mediciones FTIR in situ en condiciones de baja presión a diferentes temperaturas.

La muestra tratada en las condiciones más moderadas (510 °C, 2 h, 5 °C/min) reveló la mayor capacidad de adsorción de CO₂, posiblemente debido a una mayor conservación de grupos silanol. Esto último podría ser atribuido a una dispersión más homogénea de los grupos aminopropil durante la condensación en la etapa de grafting, facilitando la formación de mayor cantidad de pares iónicos carbamato-amonio. Adicionalmente, se observó una notable sensibilidad a la presencia de CO₂ a muy baja presión. También, la desorción de las especies quimisorbidas en vacío a 100 °C confirmó la reversibilidad del proceso.

Este estudio demostró que es posible controlar la química superficial de la MCM-41, potenciándola como un adsorbente eficiente y regenerable para la captura de CO₂ bajo condiciones moderadas.

PM-20 Fe-silicalita a partir de precursor de bajo costo para remoción de As

M R. Biangardi [1,2], M. S. Moreno [3], A. M. Pereyra [1,2]

[1] CINDECA, (CONICET-CIC-UNLP), Argentina; [2] Universidad Tecnológica Nacional, Argentina; [3] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA-CONICET, Argentina.

El acceso a agua segura es una problemática que afecta las condiciones de vida y salud de gran parte de la población. En este sentido, el uso de materiales para la remoción de contaminantes es objeto de estudio constante. El desafío se centra en obtener materiales económicos que mantengan una alta eficiencia y sean fácilmente regenerables, garantizando así un tratamiento de agua sostenible y rentable.

La Fe-silicalita es una zeolita en la que el catión Fe ocupa sitios con coordinación tetraédrica, sustituyendo isomórficamente al Si⁴⁺. La actividad de este material para la eliminación del As está relacionada con el Fe estructural y también con las especies de hierro generadas luego del tratamiento térmico post-síntesis.

En este contexto, el objetivo de este trabajo fue sintetizar y caracterizar una Fe-silicalita de bajo costo para su uso en la remoción de As⁺³. El material se obtuvo a través de un proceso hidrotermal, utilizando una solución de silicato de sodio prepolimerizado de calidad industrial como fuente de silicio. Luego se realizó un tratamiento térmico para la remoción del agente plantilla. Los difractogramas de rayos X permitieron confirmar que el material sintetizado corresponde a una estructura MFI. El Fe estructural se corroboró por la presencia de la banda correspondiente a los enlaces Fe-Si-O en el espectro de FT-IR. Las imágenes de SEM mostraron una morfología globular y mediante imágenes de HRTEM se observaron cristales de hábito prismático. El área BET fue de 356,41 m²/g. Se determinó por espectrometría de Absorción Atómica (AA) un contenido de Fe de 4 % p/p.

El material se probó en una solución de As⁺³ de concentración 50 mg/L. Los resultados de AA mostraron que 1 g/L de Fe-silicalita remueven 59,5 % de As en 4 h. Los mecanismos de remoción podrían atribuirse a fenómenos de adsorción, de precipitación, y de óxido-reducción atribuidos al Fe estructural y a los clusters de hierro ocluidos en los canales de la Fe-silicalita.

PM-21 Estabilidad Térmica e Interacciones Anfitrión-Huésped en Redes Supramoleculares de Ácido Trimesico Adsorbido sobre Grafeno

Daniela Jacquelin [1], Fernando Cometto [1], Federico Soria [2], Patricia Paredes [2], Martin Patrito [1]

[1] Departamento de Físicoquímica, Instituto de Investigaciones en Físico Química de Córdoba (INFIQC), Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina. [2] Departamento de Química Teórica y Computacional, Instituto de Investigaciones en Físico Química de Córdoba (INFIQC), Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba. Argentina..

Este estudio explora la estabilidad térmica y la dinámica de las interacciones anfitrión-huésped en redes supramoleculares formadas por ácido trimesico (TMA) adsorbido sobre grafeno, utilizando simulaciones de dinámica molecular reactiva (ReaxFF-MD). Primero, examinamos la estabilidad de las supraestructuras de TMA, como las configuraciones en honeycomb, Flower y close-packed, a temperaturas de hasta 650 K. La estructura en honeycomb resultó ser la más estable, con los enlaces de hidrógeno diméricos desempeñando un papel clave en la preservación de la integridad de la red. La incorporación de moléculas huéspedes, como moléculas adicionales de TMA, mejoró la estabilidad térmica, resaltando la importancia de las interacciones anfitrión-huésped.

A continuación, analizamos las interacciones entre la red porosa de TMA y las moléculas huéspedes, como coroneno, fullerenos (C₆₀, C₈₄, C₉₈), ciclodextrina y ácido pentanoico. El coroneno mostró la mayor estabilidad debido a sus fuertes interacciones tanto con el grafeno como con el TMA, lo que restringió la rotación molecular y mantuvo los enlaces de hidrógeno. Los fullerenos desestabilizaron la red, mientras que la ciclodextrina y el ácido pentanoico proporcionaron efectos de estabilización moderados.

Descubrimos que la estabilidad mejorada por coroneno resulta de los efectos sinérgicos entre las

interacciones coroneno-grafeno y coroneno-TMA. Las moléculas de coroneno imponen restricciones estéricas sobre el TMA, lo que evita la ruptura de los enlaces de hidrógeno y estabiliza la estructura a altas temperaturas. Aunque las moléculas de CD5 mostraron interacciones anfitrión-huésped más fuertes, la red TMA/CD5 presentó menor estabilidad térmica debido a la menor afinidad de CD5 con el grafeno.

Finalmente, nuestras simulaciones ReaxFF-MD revelaron una transición de fase inducida por coroneno hacia una estructura hexagonal porosa, consistente con la literatura. Un análisis detallado del efecto del coroneno en diversas redes supramoleculares, incluidas aquellas formadas por TMA, ácido isoftálico (ISA) y otros derivados de trifenilo, sugiere que los efectos estabilizadores dependen de las características de los poros y de las interacciones intermoleculares, ofreciendo nuevas perspectivas para el diseño de materiales porosos más robustos.

PM-22 Integración de técnicas de aprendizaje automatizado y cálculos Ab Initio para el estudio dinámico de la interacción de CO y CO₂ con Cu(110)

F. J. González [1], C. A. Tachino [1,2], A. E. Martínez [1], y H. F. Busnengo [1,2]

[1] Grupo de Físicoquímica en Interfaces y Nanoestructuras, Instituto de Física Rosario (IFIR), CONICET-UNR, Bv. 27 de Febrero 210 bis, Rosario, Argentina; [2] Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Av. Pellegrini 250, Rosario, Argentina.

El presente trabajo explora la adsorción molecular de monóxido de carbono (CO) y la adsorción disociativa de dióxido de carbono (CO₂) sobre Cu(110) a través de simulaciones de dinámica molecular utilizando potenciales interatómicos basados en cálculos ab initio y descrito a través de redes neuronales artificiales. El cobre es un material clave en catálisis debido a su capacidad para facilitar la disociación de CO₂, proceso esencial para su conversión en productos químicos de valor añadido, como por ejemplo metanol y syngas. Por otro lado, la adsorción de CO en superficies de cobre es crucial en la comprensión de reacciones catalíticas como la oxidación de CO, un paso importante en la purificación de gases de escape y en procesos de síntesis industrial.

En este caso, empleamos un enfoque basado en el uso de redes neuronales atomísticas para describir la interacción entre la molécula y la superficie, basándonos en cálculos ab initio realizados dentro del marco de la Teoría del Funcional de la Densidad. En particular, empleamos una funcional de intercambio-correlación no local que permite describir correctamente las fuerzas de dispersión de largo alcance, específicamente el funcional vdW-DF2 [Lee et al. Phys. Rev. B, 82, 081101 (2010)], con el objetivo de obtener energías de activación y probabilidades de adsorción en función de la energía (translacional y vibracional), dirección de las moléculas incidentes y temperatura de la superficie.

Los resultados de nuestras simulaciones ayudan a comprender los comportamientos observados en experimentos con haces moleculares supersónicos. Además, ilustran el potencial actual de combinar aprendizaje automatizado con cálculos de primeros principios para resolver problemas complejos en ciencia de superficies y catálisis, abarcando escalas espacio-temporales clave.

PM-23 Difusión de Hidrógeno atómico en Pt(211) con Dinámica Molecular y Monte Carlo Cinético usando Redes Neuronales Artificiales

F. J. Gonzalez [1], M. Ramos Acevedo [2] y H. F. Busnengo [3]

[1] Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Rosario, Argentina; [2] Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura (UNR), Rosario, Argentina; [3] Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Rosario, Argentina

La difusión de hidrógeno en superficies de platino es un proceso clave como paso intermedio en numerosas reacciones catalíticas. Las simulaciones tradicionales de Dinámica Molecular (MD) han enfrentado limitaciones por los altos costos computacionales para capturar la dinámica de eventos poco frecuentes como la difusión a temperaturas moderadas y bajas. Sin embargo, el uso de Redes Neuronales Artificiales (ANN) permite superar estas limitaciones, extendiendo las escalas de tiempo de simulación accesibles.

En este trabajo, generamos una Superficie de Energía Potencial basada en ANN (ANN-PES) y entrenada con cálculos de Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para simular la difusión de hidrógeno sobre Pt(211) que presenta un arreglo periódico de escalones. Esto nos permite realizar simulaciones de MD-ANN a diferentes temperaturas y obtener coeficientes de difusión en diferentes direcciones, utilizando tanto métodos de conteo de saltos como de desplazamiento cuadrático medio (MSD).

Además, implementamos un modelo de Monte Carlo Cinético (kMC) usando constantes de velocidad calculadas dentro de la Teoría del Estado de Transición (TST), con barreras de activación y factores pre-exponenciales obtenidas por DFT. Los resultados de kMC muestran una notable concordancia con las simulaciones MD-ANN en razgos generales. A pesar de la eficiencia del kMC, las simulaciones MD-ANN continúan siendo cruciales para capturar trayectorias complejas, como las que pasan por zonas tipo canaleta o saltos a vecinos muy lejanos, que no se incorporan fácilmente en modelos kMC simplificados. Este trabajo avanza en la comprensión teórica de la comparación entre técnicas MD y kMC, proporcionando además resultados cuantitativamente comparables con mediciones experimentales de catálisis a escala atómica.

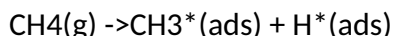
PM-24 Simulación de dinámica molecular del sticking disociativo de metano sobre la superficie de níquel (111) usando potenciales de machine learning

Sofía A. Scozziero [1,2,3]; H. Fabio Busnengo [1,2]

[1] Facultad de Cs. Exactas, Ing. y Agr., Universidad Nacional de Rosario [2] Instituto de Física de Rosario, CONICET [3] Comisión Nacional de Energía Atómica

La producción de syngas a partir de metano es un proceso relevante en varias industrias y una potencial herramienta para reducir las emisiones en el sector energético [1].

Se mejora el proceso con catalizadores metálicos, donde su paso limitante es la reacción de sticking disociativo de la molécula sobre la superficie del catalizador [2].



Entender este mecanismo es crucial para el desarrollo de nuevos catalizadores [1].

En este trabajo, presentamos simulaciones de la reacción sobre la superficie (111) de níquel. Nuestro método se basa en simulaciones de dinámica molecular clásica empleando un potencial atomístico de redes neuronales [3]. Estos potenciales se construyen ad hoc para cada sistema al ser entrenados sobre datos de estructura electrónica, y pueden reproducir sus energías con un costo computacional menor en varios órdenes de magnitud. Esto permite simular un gran número de trayectorias, necesario para construir buenas estadísticas en distintos regímenes, algo irrealizable con dinámica ab initio.

La principal producción de nuestro estudio son las curvas de sticking disociativo para CH₄ y CHD₃. Discutimos la influencia de deformaciones de la superficie y sitio de impacto, energía traslacional y vibracional de la molécula e intercambio isotópico de hidrógeno.

Nuestros resultados van en línea con trabajos previos teóricos [4-7] y experimentales [7-8], aunque tenemos discrepancias en el régimen de baja energía de la molécula.

[1] Zhang et al. (2021). *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 149, 111330.

[2] Holmblad et al. (1995). *J. Chem. Phys.*, 102(20), 8255–8263.

[3] Behler. (2021). *Chem. Rev.*, 121(16), 10037–10072.

[4] Zhou & Jiang. (2018). *Sci. China: Chem.*, 61(9), 1134–1142.

[5] Jackson & Nave. (2013). *J. Chem. Phys.*, 138(17).

[6] Guo & Jackson. (2015). *J. Phys. Chem. C*, 119(26), 14769–14779.

[7] Nattino et al. (2016). *J. Phys. Chem. Lett.*, 7(13), 2402–2406.

[8] Campbell et al. (2015). *J. Phys. Chem. A*, 119(50), 12434–12441.

PM-25 Interacciones de Oligonucleótidos en Superficies de TiO₂: Un Estudio mediante DFT y Simulaciones Atomísticas de Dinámica Molecular

Federico Soria [1], Paulo Siani [2] Cristiana Di Valentín [2]

[1] Departamento de Química Teórica y Computacional. Instituto de Investigaciones en Físico Química de Córdoba (INFIQC-CONICET). Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, X5000HUA Córdoba, Argentina, [2] Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università di Milano Bicocca, via R. Cozzi 55 20125 Milano Italy

Este trabajo se centra en la interacción entre oligonucleótidos y superficies de dióxido de titanio (TiO₂), con el objetivo de proporcionar una comprensión detallada de las fuerzas que gobiernan estas interacciones, esenciales para diversas aplicaciones biotecnológicas. A través de una combinación de cálculos de Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) [1] y simulaciones de Dinámica Molecular (MD)[2], se estudió la adsorción de componentes del ADN (bases, nucleótidos y segmentos de ADN de cadena sencilla) sobre la superficie anatasa (101) de TiO₂.

Los cálculos de DFT revelaron que tanto los aniones fosfato como las bases nucleicas pueden anclar los nucleótidos a la superficie de TiO_2 de manera colaborativa, generando una adsorción sinérgica. Los nucleótidos que contienen guanina presentaron la adsorción más fuerte, mientras que los basados en timina mostraron una menor afinidad. Además, el análisis incluyó el efecto del agua en la adsorción, concluyendo que la presencia de solventes acuosos podría influir en la estabilidad de la unión entre nucleótidos y la superficie.

Por otro lado, las simulaciones de dinámica molecular demostraron que la interacción inicial de los segmentos de ADN de cadena sencilla (ssDNA) con TiO_2 ocurre principalmente a través de enlaces de hidrógeno entre las bases nucleicas y la superficie, seguido por una interacción fuerte con el grupo fosfato terminal. De las bases estudiadas, la adenina mostró la mayor afinidad, mientras que la timina presentó la menor. Asimismo, se observó que las purinas interactúan con mayor fuerza cuando la superficie está cargada negativamente, proporcionando información sobre cómo el pH y otras condiciones afectan las interacciones ADN/ TiO_2 . Estos hallazgos ofrecen una comprensión profunda de los mecanismos de adsorción y su dinámica, útiles para el diseño de nanoconjuntos.

[1]F. A. Soria; C. Di Valentin. *Applied Surfaces Science*, 2022, 575, 1515602024

[2]F. A. Soria; P. Siani; C. Di Valentin. *Surfaces and Interfaces*, 2024 52, 104889

PM-26 Difusión y desorción de CO sobre Cu(110) inducida por irradiación con pulsos láser

F.J. Gonzalez [1], A. Muzas[2], M. Alducin[2], I. Juaristi[2] y H.F. Busnengo[1,3]

[1] Instituto de Física Rosario (IFIR), CONICET-UNR, Bv. 27 de Febrero 210 bis, S2000EKF Rosario, Argentina; [2] Centro de Física de Materiales CFM/MPC (CSIC-UPV/EHU), Paseo Manuel de Lardizabal 5, 20018 Donostia-San Sebastián, Spain; [3] Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Av. Pellegrini 250, Rosario, Argentina

Se presentan resultados de simulaciones de dinámica molecular (MD) para estudiar los procesos de difusión y desorción inducidos por pulsos láser de duración de femtosegundos sobre Cu(110) con moléculas de CO preadsorbidas a bajo recubrimiento. La modelización se divide en dos etapas. En la primera, se desprecia el efecto de las moléculas de CO y se asume que son los electrones de la superficie de Cu(110) absorben la energía depositada por el pulso láser. Esto provoca un aumento de su temperatura e induce el calentamiento de los fonones del cristal. Estos procesos de absorción e intercambio de energía se describen mediante un modelo de dos temperaturas (2TM), caracterizado por una temperatura electrónica, T_e , y una fonónica, T_{ph} , cuyas dependencias temporales en la cercanía de la superficie se obtienen resolviendo un sistema de dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales acopladas.

En la segunda etapa, se realizan simulaciones MD para una molécula de CO adsorbida sobre Cu(110) a través de un potencial utilizando redes neuronales artificiales previamente entrenadas con cálculos DFT, y considerando el acoplamiento con electrones y fonones. El intercambio de energía de la molécula con el reservorio de electrones se describe a través de un termostato de Langevin caracterizado por la temperatura $T_e(t)$, y los núcleos atómicos del cristal con un termostato de Nosé-Hoover caracterizado por $T_{ph}(t)$.

Utilizando esta metodología, se caracterizan y cuantifican los procesos de difusión en diferentes direcciones y desorción de la molécula de CO, inducidos por el pulso láser, permitiendo individualizar la importancia relativa de los mecanismos de intercambio de energía entre molécula-electrones y molécula-fonones, que los facilitan o dificultan estos procesos.

PM-27 Simulaciones Computacionales de la Adsorción Disociativa de Metano sobre Pt(110)-(1x2) Utilizando Técnicas de Aprendizaje Automatizado

G. Kulemeyer [1], H.F. Busnengo [1] [2]

[1] Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Argentina; [2] Instituto de Física de Rosario, Argentina.

Las reacciones de disociación de moléculas en superficies metálicas a menudo representan el paso limitante en los procesos de catálisis heterogénea, como el reformado con vapor utilizado en la industria para producir hidrógeno molecular. Este trabajo busca generar un potencial de red neuronal (PRN) capaz de describir la interacción del sistema CH₄/Pt(110).

Mediante la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) se generó una base de datos (BD) de configuraciones atómicas, la cual fue utilizada para entrenar un PRN. La BD fue ampliada de forma iterativa, utilizando el PRN en simulaciones de Dinámica Molecular para describir el movimiento de la superficie y la interacción CH₄/Pt(110), hasta comprobar una descripción apropiada de los datos DFT a través del PRN.

Se presentan resultados de probabilidades de adsorción disociativa y atrapamiento molecular, que se comparan con resultados experimentales y los de trabajos teóricos previos. Se observa un aumento de la probabilidad de adsorción disociativa con la energía de incidencia de las moléculas y la temperatura en buen acuerdo cualitativo con datos experimentales.

PM-28 Estudio de espumas híbridas a base de aluminosilicatos naturales para remoción de contaminantes en agua

Ingrid Y. Medina Mojica [1], Ruth D. Mojica Sepúlveda [1], María B. Peroni [2], María B. Colombo [3], Luis J. Mendoza Herrera [1], Mercedes Muñoz [2], Myrian Tebaldi [1,4]

[1] Centro de Investigaciones Ópticas (CONICET-CIC-UNLP), La Plata, Argentina. [2] CINDECA (CONICET-CIC-UNLP), Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina. [3] CEDECOR (UNLP-CIC), Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina [4] Departamento Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, Argentina.

De la necesidad de eliminar contaminantes generados por la actividad humana, surge el desafío de desarrollar nuevos materiales capaces de resolver estas problemáticas. Entre los compuestos que generan contaminación están los oxoaniones, colorantes y contaminantes emergentes.

En el presente trabajo se utilizaron tierras de diatomeas, cenizas volcánicas y caolines combinados con urea y quitosano para producir adsorbentes híbridos de amplio espectro.

Las sílices naturales y biopolímeros resultan adsorbentes efectivos, de bajo costo y amplia disponibilidad. En este sentido, resulta de interés obtener materiales porosos multifuncionales mediante la aplicación de tecnologías ambientalmente limpias (temperatura y presión atmosféricas).

En el presente trabajo se prepararon espumas híbridas porosas adsorbentes a partir de diatomitas, metacaolines y cenizas volcánicas con quitosano (desacetilado de la quitina ampliamente disponible a bajo costo). Se utilizó además silicato de sodio y surfactante como "templates". También se estudió el remplazo de quitosano por urea.

Los sistemas se caracterizaron y evaluaron catalíticamente como adsorbente/catalizadores.

Mediante espectroscopía Raman se pudo corroborar la interacción quitosano/urea con la espuma híbrida. Se realizó el estudio morfológico por SEM, corroborándose la formación de un material espumado de baja densidad.

El análisis textural por isoterma de adsorción de N₂ fue complementado por la técnica de laser speckle dinámico, la cual estudia la higroscopicidad de los sistemas, y así poder determinar una mejor correlación de la porosidad. Las espumas presentaron una amplia distribución de poro (100 a 400 microm.).

De esta manera se sintetizaron potenciales adsorbentes/catalizadores que se evaluaron en remoción de oxoaniones y colorantes utilizando técnicas de simpleza operativa y en condiciones eco-compatibles. Se pudo observar que la incorporación del quitosano mejora la eficiencia de los sistemas.

PM-29 Propiedades electroquímicas y estabilidad térmica de películas delgadas mesoporosas de YSZ para aplicaciones en SOFC

B. Sievers [1,2], L. Granja [1,2], A. Zelcer[3], D. Juan. [1,2], V. Ferrari [1,2], S. Passanante [1,2], V. Lombardo [2,4], M. C. Fuertes [2,4], R. Fuentes [1,2], J. Sacanell [1,2]

[1] Departamento de Física de la Materia condensada, Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Centro Atómico Constituyentes, CNEA. [2] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, Centro Atómico Constituyentes, CNEA-CONICET. [3] CIBION-CONICET. [4] Gerencia Química, Centro Atómico Constituyentes, CNEA. Av. General Paz 1499, (1650) Villa Maipú, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

Se depositaron películas delgadas de circonia estabilizada con itria al 4 % mol en sustratos de sílica amorfa, tanto en forma densa como mesoporosa. Se analizaron los efectos de la temperatura en la mesoestructura aplicando diferentes tratamientos térmicos a las muestras dentro del rango de condiciones operativas de las SOFC. Las mediciones de espectroscopía de impedancia electroquímica evidenciaron un único mecanismo, consistente con la conducción de iones de oxígeno a través de los límites de grano y la superficie. Nuestros resultados muestran que la presencia de una porosidad altamente accesible mejora la conductividad iónica superficial, reduciendo la energía de activación del proceso global. Además, se realizaron cálculos basados en la teoría del funcional de densidad en la superficie (110) para estimar las barreras energéticas asociadas. Los resultados sugieren que el transporte iónico a lo largo de la superficie de los poros accesibles conectados con la atmósfera podría explicar la reducción observada en la energía de activación.

PM-30 Síntesis de materiales porosos de carbón por fotopolimerización de resinas sobre superficies de ZnO

A.V. Torres-Delgado[1], *R. Coneo-Rodríguez* [1], *R.A. Ponzio* [1], *M.S. Moreno* [2], *G.A. Planes* [1]

[1] Facultad de Ciencias Exactas Físicoquímicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto, Ruta Nac. 36, Km 601, Río Cuarto, Córdoba, Instituto de Investigaciones en Tecnologías Energéticas y Materiales Avanzados (IITEMA), Argentina; [2] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, INN, CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche, S. C. Bariloche, 8400, Argentina

El presente trabajo discute una estrategia de síntesis que apunta a obtener materiales conductores combinando gran área superficial con elevada accesibilidad a electrolitos, destinados a aplicaciones electroquímicas de almacenamiento y conversión de energía en los que se requiera de elevadas velocidades de respuesta. El método expuesto explora el uso de semiconductores en un doble rol, como moldes rígidos, por un lado, y por el otro como iniciador de polimerización/deposición de un segundo material.[1] La estrategia parte de la síntesis de un semiconductor nano-estructurado, formado por nano-varillas de ZnO con alta relación de aspecto, que puede ser estabilizado en solución como fase coloidal altamente dispersa. La elevada relación de aspecto permite contactos puntuales entre estructuras dispersas, dando lugar a un ensamble estable y continuo del semiconductor en su medio dispersante, pero evitando la aglomeración que conduciría a estructuras más compactas. Las capacidades fotoactivas del semiconductor son aprovechadas para catalizar la polimerización, sobre el mismo, de un precursor (resorcinol + formaldehído (RF)) presente en el medio dispersante. Al ser expuesta la dispersión a radiación en el intervalo del ultravioleta, se origina un recubrimiento delgado y continuo sobre esta fase dispersa de ZnO, generando un material monolítico híbrido (RF-ZnO) termoestable. Por posterior pirolisis se obtiene un compuesto Carbón-ZnO que puede utilizarse sin posteriores tratamientos (por ejemplo en baterías Li-S), o eliminarse la fase mayoritaria de ZnO para formar un aerogel de carbón. En este trabajo se presentan las características generales de materiales obtenidos a partir de dos estructuras de ZnO diferentes, así como los efectos de algunas variables (longitud de onda de irradiación, tiempo de exposición, tipo de nanoestructura) sobre las características electroquímicas de los materiales resultantes.

[1] Ponzio et al. *J Solid State Electrochem* 28, 2081–2091 (2024)

PM-31 Descifrando el mecanismo de transferencia de carga en puntos cuánticos semiconductores

Rovasio, Valentina Andrea [1]; *Iglesias, Rodrigo Alejandro* [2]; *Oviedo, María Belén* [1]

[1]Departamento de Química Teórica y Computacional, FCQ, UNC. INFIQC-CONICET. Córdoba, Argentina
[2]Departamento de Físicoquímica, FCQ, UNC. INFIQC-CONICET. Córdoba, Argentina

En los últimos años, los puntos cuánticos semiconductores (Qdots) han captado gran atención en los ámbitos académico y tecnológico debido a sus propiedades dependientes del tamaño y su síntesis

en solución, lo que los convierte en candidatos ideales para aplicaciones en una amplia variedad de dispositivos optoelectrónicos. En este contexto, lograr una conversión de energía controlada y con pérdidas mínimas ha sido un objetivo continuo de la investigación en estos campos.

Particularmente en dispositivos fotovoltaicos, el modelo aceptado actualmente para el funcionamiento básico consta de un primer paso que consiste en la absorción de un fotón y la creación de un par electrón-hueco espacialmente localizado. Sin embargo, a nuestro entender, la información sobre este mecanismo de formación del excitón es limitada. En este trabajo, presentamos un análisis detallado de dicho mecanismo en semiconductores inorgánicos y perovskitas de escala nanométrica.

Para abordar este estudio, utilizamos diversos niveles de teoría basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), incluyendo DFT dependiente del tiempo (TD-DFT), lo que nos permite ofrecer una descripción atomística y mecanocuántica precisa. Un aspecto clave de nuestro trabajo es la exploración de cómo los diferentes ligandos en los Qdots influyen en la estabilización del par electrón-hueco. Mediante simulaciones de dinámica electrónica en tiempo real, mostramos cómo estos ligandos afectan la formación y estabilidad del excitón, así como el mecanismo de transferencia de carga entre puntos cuánticos separados por distancias nanométricas. Nuestros resultados proporcionan una perspectiva mecanocuántica que permite orientar los esfuerzos para mejorar las propiedades fotovoltaicas de los dispositivos.

PM-32 Efecto de aditivos sobre la formación de interfases catódicas en celdas

Li^o/LFP

Nicolas Gomez Alicandro, Melina Cozzarin, Sofía Gómez, Jorge Andrés Donadelli

YPF-Tecnología S. A., Av. Del Petróleo s/n - (entre 129 y 143), (1923) Berisso – Buenos Aires, Argentina

Las baterías de ión-litio han logrado establecerse en el mercado mundial como las más convenientes para el almacenamiento de energía. En particular, aquellas que utilizan LiFePO₄ (LFP) como material activo catódico tienen la ventaja de ser más seguras y estar libres de metales como Níquel y Cobalto, por lo que hoy son de las más requeridas para electromovilidad. La vida útil de las celdas está limitada por la cantidad de ciclos de carga y descarga que soportan, lo cual depende, en parte, de la composición de las interfaces anódica (SEI) y catódica (CEI o SPI) del electrolito. Dichas interfases están formadas por productos de descomposición del electrolito y del solvente durante el ciclado de la celda, y su composición puede regularse mediante el agregado de pequeñas proporciones de aditivos en el electrolito.

En este trabajo se estudió la interfaz catódica de celdas LiO/LFP que utilizan como electrolito LiPF₆ disuelto en una solución de 50 % carbonato de dimetilo (DMC): 50 % carbonato de etileno (EC). Se compararon los resultados de 4 celdas:

- Celda 1: Sin ciclar (prístina)
- Celda 2: Sometida a 100 ciclos de carga y descarga (Sin aditivos)
- Celda 3: Con agregado de Vinil Carbonato (VC) al 1 % y ciclada 100 veces
- Celda 4: Con agregado de Carbonato de Fluoro Etileno (FEC) al 1 % y ciclada 100 veces

Estas interfases se estudiaron superficialmente mediante espectroscopía de Fotoelectrones Inducida por Rayos X (XPS), donde se estudió la especiación del C, el P, el O y el F. Adicionalmente, se hicieron bombardeos con un cañón de Ar para evaluar el cambio en la composición elemental con la profundi-

dad.

Se encontró que luego de los 100 ciclos, la celda sin aditivos presentó una interfase de 0.5 nm formada por productos de descomposición del solvente y del electrolito (LiF y LiPOxFy). El agregado de VC como aditivo promueve la generación de una interfaz de mayor espesor (1.0 nm) con mayor proporción de productos orgánicos oxidados formados a partir del VC. El FEC en cambio promueve la generación de una interfaz de menor espesor (0.3 nm) con mayor proporción de LiPOxFy.

PM-33 Caracterización estructural, morfológica y elemental de electrodos de celdas SOFC decorados con nanopartículas de plata

E. Tagarelli [1][2][3], E. Martinez [1][3][4], G. Ruano [1][4], H. Troiani [1][4], A. Montenegro-Hernandez [1][3][4]

[1] Centro Atómico Bariloche-Comisión Nacional de Energía Atómica (CAB-CNEA), Bariloche, Argentina. [2] Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional La Plata, (UTN- FRLP) Berisso, BA, Argentina. [3] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (INN), Argentina. [4] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), CABA, Argentina.

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) son dispositivos electroquímicos que transforman energía química en eléctrica con un alto rendimiento, ofreciendo una alternativa limpia y eficiente para la generación de electricidad con una gran flexibilidad para operar con diferentes combustibles. Con el fin de aumentar su vida útil y reducir los costos de operación, la investigación en SOFC se centra en disminuir la temperatura de operación, de manera que los electrodos operen a temperaturas inferiores a 700°C.

En ese sentido, el titanato de estroncio dopado con lantano (LST) se presenta como un material prometedor para cumplir la función de electrodo de combustible debido a su estabilidad térmica y química, y sus características de conductividad mixta (iónica y electrónica) en atmósferas reductoras. Sin embargo, hemos observado [1] que la adsorción disociativa del H₂ sobre la superficie del electrodo es un mecanismo limitante, provocando una caída óhmica significativa.

Con el propósito de mejorar la respuesta electroquímica del material, se infiltraron nanopartículas de plata (Ag-NPs) utilizando un método en fase líquida de reducción química. Las Ag-NPs fueron obtenidas por nucleación heterogénea dentro de los ánodos porosos mediante la inmersión de las celdas en solución con precursor metálico y agente reductor durante diferentes periodos de tiempo. La caracterización de los electrodos se realizó mediante microscopía SEM y TEM, difracción de rayos X y Rayos X inducidos por impacto de iones (PIXE). En esta última técnica, las muestras se irradiaron con protones de 3 MeV, utilizando un acelerador de iones Tandem de 1.7 MV equipado con detector de rayos X Sirius CD. Los resultados de los ensayos permitieron confirmar la efectividad de la impregnación y cuantificar la cantidad de Ag-NPs infiltradas.

1. Tagarelli E, et al. Study of LST electrochemical response as anode for SOFC and its relation with microstructure. Enviado para su publicación. Solid State Ionics.

PM-34 Transporte electrónico fotoinducido en películas delgadas de CdS

G.A. Ferreyra Vaggione [1], R.A. Iglesias [1]

[1] INFIQC-CONICET, Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, X5000HUA Córdoba, Argentina

Actualmente, existen numerosas aplicaciones que emplean semiconductores nanoestructurados (celdas solares, LED, entre otros). El funcionamiento de estos dispositivos depende principalmente del mecanismo de transporte de carga, el cual, en semiconductores nanoestructurados, se cree que ocurre a través de estados localizados entre las bandas de valencia y conducción, generados por defectos cristalinos (estados trampa) [1]. Esto genera una movilidad electrónica más lenta que en semiconductores monocristalinos. Sin embargo, la descripción detallada de este mecanismo es aún incompleta.

En este estudio, se investigó el transporte electrónico en películas delgadas de CdS. Para fabricar las películas, se empleó una metodología implementada en nuestro laboratorio, que consiste en una precipitación controlada de CdS por deposición alternada de Cd(Acetato)₂ y Na₂S por spin coating. El crecimiento se monitoreó con espectrofotometría UV-Vis, mostrando una relación lineal entre la absorbancia y el número de ciclos de deposición, lográndose películas homogéneas y reproducibles, con alto control del espesor.

Para evaluar el transporte electrónico, se utilizó la técnica de fotocorriente de tiempo de vuelo [2], irradiando la muestra con un pulso láser de nanosegundos, generando portadores de carga en un pequeño espesor del material. Se midió el perfil de fotocorriente cuando los electrones se transportan hacia el contacto eléctrico, proporcionando una medida directa del tiempo de transporte. Sorprendentemente se encontró que, en el rango de espesores medidos, el transporte es más rápido en películas más gruesas, lo que podría deberse a una mayor densidad de estados trampa en las películas delgadas o a efectos derivados del campo eléctrico interno en el semiconductor. Actualmente, se están evaluando diferentes modelos para explicar estas observaciones.

[1] Anta, Juan A. Curr. Opin. Colloid Interface Sci. 17 (2012) 124.

[2] Barnes, Piers RF, et al. Adv. Mater. 25 (2013) 1881.

PM-35 Nuevos sólidos electroactivos para su aplicación en baterías de flujo redox

Autores: T. R. Filippini [1], M. Regueiro Psechepiurca [1,2], F. Battaglini [1,2], L. L. Coria Oriundo [1,2], M. Tagliazucchi [1,2]

Afiliaciones: [1] Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEyN-UBA, Argentina; [2] Instituto de Química, Física de Materiales, Medio Ambiente y Energía, UBA-CONICET, Argentina

Las baterías de flujo redox (BFR) son dispositivos de almacenamiento y conversión de energía electroquímica que se basan en la reacción entre dos fluidos electroactivos, los cuales se hacen circular por

una celda en procesos carga o descarga de energía. Dado que la capacidad de almacenamiento de energía está determinada por la concentración de la especie electroactiva, las BFR estarán limitadas por la solubilidad de dicha especie. Una alternativa frente a estas limitaciones es la implementación de la estrategia de redox targeting, la cual utiliza un sólido electroactivo junto con una especie electroactiva en solución (mediador) que transporta las cargas desde el sólido electroactivo hacia el reactor de la batería o viceversa.

En este trabajo se sintetizaron sólidos electroactivos a partir resinas de intercambio catiónico (poliestirensulfonato entrecruzado) y de moléculas redox (MR) derivadas de fenazina y fenotiazina: Azure A (AZA) y Rojo neutro (NR). Las resinas fueron modificadas mediante la formación de una unión sulfonamida entre los grupos sulfonato de la resina y el grupo amino de las MR, o mediante interacciones débiles entre las estructuras de la resina y las MR (electrostáticas o π - π stacking).

A partir de espectros infrarrojo se identificaron bandas características asociadas a las vibraciones del enlace sulfonamida y/o de las propias MR, lo cual verificó la incorporación de MR en la estructura de la resina. Mediante titulación redox y/o análisis elemental se determinó la capacidad teórica de los sólidos modificados, obteniendo valores de 7.6 mA.h/g para la resina-AZA covalente y 17.2 mA.h/g para la resina-NR iónica.

Dado que estas MR presentan baja solubilidad, absorción en el UV-visible y poseen el mismo potencial redox que el sólido electroactivo, se utilizaron como mediadores, verificando la reacción entre el sólido electroactivo oxidado y la MR reducida en solución. Este resultado muestra el potencial uso de estos sistemas en BFR acuosas y de bajo costo.

PM-36 Reactividad de Li, Na y Mg metálicos y su implicancia en la formación de la SEI: un estudio detallado de XPS

N. Plebani [1], A. Calderón [2], V. Bracamonte [2], M. Otero [2], G. Luque [1], F. Cometto [1]

[1] INFIQC, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina; [2] IFEG, Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina.

Entre los metales alcalinos y alcalinotérreos más utilizados en baterías recargables, litio (Li), sodio (Na) y magnesio (Mg) han sido los más estudiados tanto en su forma metálica como en aleaciones. Aunque las baterías de iones de litio han demostrado estabilidad y alta densidad de energía gravimétrica¹, su capacidad teórica limitada ha promovido la búsqueda de alternativas, como las baterías Li-Metal, Na-Air y Mg-S. Estos sistemas, sin embargo, presentan desafíos operativos significativos, principalmente debido a la reactividad de los metales, lo que conlleva la formación de productos no electroactivos y la creación de una Interfase Electrolítica Sólida (SEI) sobre la superficie del electrodo. La estabilización de la SEI y de los ánodos resulta entonces, de vital importancia para asegurar la aplicabilidad de dichas baterías.

En este trabajo, se caracterizaron las superficies metálicas de Li, Na y Mg en condiciones relevantes para su uso en la construcción de celdas electroquímicas. Las superficies de estos metales fueron estudiadas mediante la técnica de espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) y su composición química comparada antes y después de realizar un raspado manual. Este enfoque permitió determinar

la composición de las especies presentes antes de la integración en la batería. Además, se llevaron a cabo múltiples procesos de decapado en las regiones analizadas para determinar la composición interna de las capas formadas. Posteriormente, se realizaron estudios del proceso de oxidación, caracterizando la superficie decapada a lo largo del tiempo. Esto permitió establecer el mecanismo y la cinética de oxidación para los metales, específicamente en un entorno de ultra alto vacío, inherente al equipo de XPS.

Referencias

(1) Kulova, T. L.; Fateev, V. N.; Seregina, E. A.; Grigoriev, A. S. A Brief Review of Post-Lithium-Ion Batteries. *International Journal of Electrochemical Science* 2020, 15 (8), 7242–7259.

PM-37 Reciclaje de ITO en tecnología solar de perovskita: Un paso hacia la economía circular en fotovoltaica

María V. Gallegos [1]; Lidon Gil-Escrig [2]; Lucas Melia [3]; Kassio P.S. Zanoni [2]; Henk J. Bolink [2]; Laura C. Damonte [3].

[1] Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco” (CINDECA), CCT La Plata – CONICET, CICPBA, Universidad Nacional de La Plata, Argentina. [2] Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia, 46980 Paterna, España. [3] Instituto de Física La Plata, CCT-CONICET-UNLP, Argentina.

Las celdas solares de perovskita (PSC) han emergido como una tecnología fotovoltaica prometedora debido a su alta eficiencia y bajo costo de fabricación comparados con las celdas de silicio tradicionales. Sin embargo, la sostenibilidad y el reciclaje de sus componentes siguen siendo desafíos importantes para su adopción a gran escala. En particular, el óxido de indio y estaño (ITO), utilizado como electrodo transparente, representa una parte significativa del costo y el impacto ambiental de estos dispositivos. El presente estudio aborda el reciclaje de sustratos de ITO de PSC agotadas, con el objetivo de reducir costos y minimizar el impacto ambiental. Se investigan dos métodos de recuperación utilizando soluciones diluidas de ácido cítrico o hidróxido de potasio (KOH) a temperatura ambiente. Los sustratos de ITO reciclados fueron caracterizados mediante diversas técnicas, incluyendo difracción de rayos X, espectroscopía UV-vis, mediciones de resistencia laminar, microscopía de fuerza atómica, microscopía electrónica de barrido, y XPS.

Los resultados mostraron que el tratamiento con KOH preserva las propiedades del ITO original en comparación con el tratamiento ácido. Los sustratos tratados con KOH mostraron transmitancia óptica, morfología superficial, composición elemental y topografía similares a los sustratos originales. Además, se fabricaron nuevos dispositivos PSC utilizando estos sustratos reciclados, logrando eficiencias de conversión de energía del 18 %, idénticas a las obtenidas con sustratos vírgenes. Esto demuestra la viabilidad de reciclar y reutilizar sustratos de ITO de células solares de perovskita agotadas mediante un proceso económico y respetuoso con el medio ambiente.

Este enfoque contribuye significativamente a reducir los costos de fabricación de dispositivos y aborda los desafíos relacionados con la escasez de indio, promoviendo así una perspectiva más sostenible para la tecnología fotovoltaica de perovskita. El proceso desarrollado opera a temperatura ambiente, lo que conlleva un ahorro energético significativo, y utiliza soluciones diluidas, optimizando los costos sin comprometer la eficacia.

En conclusión, este trabajo presenta una solución prometedora para el reciclaje de componentes críticos en PSC, allanando el camino hacia una producción más sostenible y económica de esta tecnología fotovoltaica emergente.

PM-38 Estudios teóricos y experimentales de biocarbón de café como material catódico para baterías de Li-S

L. Morel [1], V. Bracamonte [2], M. Zoloff Michoff [1], F. Cometto [3] y G. Luque [1]

[1] INFIQC, Departamento de Química Teórica y Computacional, FCQ, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Córdoba, Argentina; [2] IFEG, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Córdoba, Argentina; [3] INFIQC, Departamento de Físicoquímica, FCQ, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Córdoba, Argentina

Las baterías de Li-S están compuestas por un ánodo de litio metálico, un cátodo de azufre y un electrolito no acuoso, y presentan una densidad de energía superior a las baterías de iones de litio. Su potencial para reducir costos y su menor impacto ambiental las posicionan como una alternativa atractiva para aplicaciones de almacenamiento de energía. Sin embargo, su implementación práctica se ve limitada por la baja conductividad eléctrica inherente del azufre, lo que requiere su incorporación en un material conductor, y por la solubilidad de los polisulfuros de litio de cadena larga en el electrolito, lo cual impacta negativamente en la estabilidad cíclica de las baterías.

De este modo el objetivo central de este trabajo fue desarrollar y optimizar materiales basados en biomasa derivada de residuos de café como cátodos en baterías de Li-S.

Se empleó una metodología experimental y teórica que incluyó la pirólisis controlada de residuos de café, y la activación del biocarbón resultante. Adicionalmente, se realizaron cálculos computacionales a nivel DFT (Teoría del Funcional de la Densidad) de carbonos amorfos para estudiar la adsorción de polisulfuros. Los estudios fisicoquímicos y electroquímicos comparativos se llevaron a cabo utilizando técnicas como microscopía electrónica de barrido, difracción de rayos X, espectroscopía de fotoelectrones de rayos X, análisis de área superficial, y análisis termogravimétrico (para determinar la cantidad de azufre en la muestra).

Se observó que la activación modificó la estructura del material, creando poros y aumentando el área superficial. Los microporos mejoraron la respuesta electroquímica del cátodo de azufre. Los biocarbonos activados mostraron mejor ciclabilidad, capacidad específica y eficiencia coulombica que los no activados. Incluso a altas densidades de corriente, mantuvieron su capacidad, destacando así su robustez y efectividad para aplicaciones en dispositivos de almacenamiento de energía.

PM-39 Evolución estructural, morfológica y textural de cermets nanocristalinos mesoporosos Gadolinium-Doped Ceria (GDC), NiO:GDC y FexOy/NiO:GDC durante su sinterizado en atmosferas oxidante y reductora

Ramiro Domínguez Chena [1,2], Mario Moreno [1,3], Federico Napolitano [1,3], Marcelo Esquivel [1,3], Horacio Troiani [1,3], Alejandra Montenegro Hernández [1,3] y Corina Chanquía [1,3]

[1] Departamento Caracterización de Materiales, Gerencia de Investigación Aplicada, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CAB-CNEA), San Carlos de Bariloche, Argentina. [2] Instituto Balseiro, Av. Ezequiel Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche, Argentina. [3] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

Este trabajo presenta la evolución estructural, morfológica y textural de nanopolvos GDC, NiO:GDC, y FexOy/NiO:GDC mesoporosos durante el proceso de sinterizado en atmósferas oxidante (aire) y reductora (Ar/H₂). Los nanopolvos GDC y NiO:GDC fueron sintetizados mediante co-precipitación mono- y bi-fásica respectivamente, mientras que el FexOy/NiO:GDC fue obtenido mediante deposición-precipitación usando el cermet Ni(OH)₂-GDC mesoporoso previamente sintetizado como soporte. Los nanopolvos resultantes se caracterizaron mediante difracción de rayos X (DRX), fisisorción de N₂, microscopía electrónica (barrido y transmisión), difracción de electrones y dilatometría diferencial. Mediante refinamiento Rietveld de los patrones DRX empleando el programa FULLPROF se obtuvieron los parámetros estructurales y tamaños de las nanocristalitas de las diferentes fases en los diferentes estadios del sinterizado. La matriz de GDC de fase pura está compuesta de nanocristales (6 nm) fuertemente interconectados y presenta un área superficial específica de alrededor de 70 m²/g. Mientras que el cermet Ni(OH)₂:GDC recién sintetizado se compone cristales tipo aguja Ni(OH)₂ de mayor tamaño (100x10 nm), sobre las cuales se observan depositados los nanocristales de CGO (8 nm), presentando un área superficial específica alrededor de 120 m²/g. Posteriormente se prepararon discos por prensado uniaxial de los diferentes polvos precursores mezclados con polivinilbutiral (PVB), el cual actúa como ligante, para luego someterlas a tratamientos térmicos de sinterizado con diferentes temperaturas y rampas de calentamiento en atmósfera oxidante y reductora. El objetivo de este trabajo es explorar, evaluar e identificar condiciones óptimas de sinterizado de electrodos a fin de prever/evitar posteriores problemas de delaminación de capas al momento de construir, mediante co-sinterizado ánodo/electrolito, monoceldas SOFC ánodo-soportadas.

PM-40 Preparación y caracterización de materiales compuestos PVDF/BT para la recolección de energía.

N. Mamana [1] [2], V. Roldán [1], R. Machado [1] [2], S. Barolin [1] [2], N. Pellegrini [1] [2], y A. Di Loreto [1] [3]

[1] Instituto de Física Rosario, FCEIA- CONICET, Argentina; [2] Fac. Cs. Exactas, Ingeniería y Agrimensura-UNR, Argentina; [3] Fac. Cs. Bioquímicas y Farmacéuticas-UNR, Argentina

Los requerimientos de miniaturización y portabilidad de los dispositivos electrónicos demandan la mejora del rendimiento de los sistemas de conversión y almacenamiento de energía. Los capacitores dieléctricos son idóneos para satisfacer esta demanda aunque se encuentran acotados por la baja densidad de energía. El fluoruro de polivinilideno (PVDF) es un dieléctrico adecuado siendo liviano, fácil de procesar y resistente a la ruptura, aunque con una constante dieléctrica media, además tiene propiedades piezoeléctricas. La incorporación de BaTiO₃ (BT) al PVDF permite aumentar la

constante dieléctrica llevando a una mayor densidad de energía y así un mejor desempeño para el almacenamiento de energía. Los materiales compuestos suelen presentar aglomerados de partículas inorgánicas, porosidad y defectos en las interfaces que llevan a una disminución de las propiedades dieléctricas ya mencionadas. La dispersión del BT en PVDF puede mejorarse modificando la superficie para que tenga mayor afinidad por la matriz polimérica. En este trabajo se proponen diferentes estrategias de funcionalización superficial del BT y su incorporación en películas de PVDF, obtenidas mediante la técnica tape casting. Así, se obtuvo BT funcionalizado con ácido oleico y polivinilpirrolidona (PVP) conteniendo aproximadamente un 3 %P/P de orgánicos según se determinó del análisis térmico. Alternativamente se funcionalizó la superficie en dos pasos consistentes en hidroxilación seguida de adición de PVP. Se comprobó que la etapa de hidroxilación permitió incrementar la magnitud de la funcionalización superficial hasta alcanzar el 8 %P/P. A continuación se prepararon películas conteniendo el 10, 20 y 40 % P/P de todas las partículas de BT funcionalizadas, disueltas en PVDF. En todos los casos se obtuvieron películas semicristalinas de espesores del orden de 50 μm . Se analiza el efecto de la funcionalización superficial del BT y su impacto en las propiedades estructurales, morfológicas y eléctricas.

PM-41 **Colectores de corriente modificados con una red orgánica covalente a base de melamina para baterías de litio sin ánodos**

F. Eroles[1,2], G. Luque[2,3], F. Cometto[1,2]

[1] Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Físicoquímica, Córdoba, Argentina; [2] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Instituto de Investigaciones en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), Córdoba, Argentina; [3] Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Teórica, Córdoba, Argentina.

Las baterías de iones de litio sin ánodo representan un avance revolucionario en la tecnología de almacenamiento de energía, con el objetivo de mejorar el rendimiento y la sostenibilidad de los sistemas tradicionales de ion-litio. A diferencia de las baterías de ion-litio convencionales, que incluyen un ánodo generalmente hecho de grafito, las baterías sin ánodo eliminan este componente por completo y dependen en su lugar del litio depositado sobre el colector de corriente durante los primeros ciclos de carga. Este diseño innovador no solo reduce el peso total de la batería, sino que también aumenta su densidad energética. Sin embargo, estas baterías sufren un crecimiento dendrítico significativo durante el ciclo de deposición de litio que puede causar cortocircuitos y disminuir la ciclabilidad de la celda. Una estrategia prometedora para mitigar estos inconvenientes es modificar la superficie del colector de corriente para promover un recubrimiento más homogéneo de los iones de litio. Para esto, las redes covalentes orgánicas (COF) han sido de gran interés debido a las capas bidimensionales y porosas de estos materiales, que les permiten transportar portadores de carga de una manera similar al grafeno, y simultáneamente diseñar el tamaño de los poros y los grupos funcionales disponibles. En este trabajo, proponemos un electrodo de cobre modificado con una estructura orgánica covalente a base de melamina sintetizada in situ como un colector de corriente eficaz para baterías de litio sin ánodo. Para lograr esto, se utilizó una solución diluida de monómeros (melamina y tereftalaldehído) en etanol para realizar la síntesis mediante un 'drop casting' sobre un electrodo de cobre calentado, donde estos reaccionan a través de un mecanismo de Schiff-base para formar una red covalente 2D porosa. Estas superficies se caracterizaron y optimizaron a través de espectroscopia de fotoelectrones

de rayos X y SEM. Luego, se determinó la ciclabilidad y la vida útil de estos electrodos a través de experimentos de carga/descarga electroquímica en celdas de moneda con una configuración asimétrica (Li-Cu).

PM-42 Inhibición del crecimiento de biofilms por antimicrobianos de origen natural

L. M. Saleh Medina [1][2], V. Castro [1], C. Dobrecky [3,4,5], S. Flor [3,5,6,], I. K. Levy [2] R. M. Negri [1][2]

[1] DQIAyQF – FCEN UBA, Argentina [2] Laboratorio de Materiales Compuestos y Energía - INQUIMAE CONICET FCEN UBA, Argentina [3] UBA FFyB Depto de Farmacología. Cátedra de Farmacobotánica Bs As Argentina [4]UBA FFyB Depto de Tecn Farm Cátedra de Tecnología Farmacéutica I Bs As Argentina [5] UBA FFyB Instituto de Tecn Farm y Biofarm (InTecFyB). Bs As, Argentina [6] UBA FFyB Depto de Cs Qcas

La formación de biofilms (BF) afecta a los procesos de purificación de aguas, trayendo aparejadas pérdidas económicas y materiales. Si bien existe en el mercado una gran variedad de sustancias que limitan el crecimiento de BF, su uso excesivo está generando consecuencias negativas tanto para la salud humana y el ambiente como resistencia de los microorganismos. Las cáscaras de cítricos son una fuente rica de flavonoides, compuestos fenólicos y aceites esenciales que han demostrado tener efecto antimicrobiano.

Se prepararon esponjas de polivinilalcohol (PVA) cubiertas con polidimetilsiloxano (PDMS) con extracto de cáscaras de limón por liofilización. La estabilidad de las esponjas en agua aumentó por agregado de ácido cítrico o málico que entrecruzan las cadenas de PVA. La adición de extracto de limón generó una estructura porosa más abierta e interconectada, con poros del orden de 700 μm de diámetro. La cinética de liberación del extracto en medio líquido fue seguida por espectrofotometría UV-Vis y analizada con los modelos de Korsmeyer-Peppas y Peppas-Sahlin. Se observó que la velocidad y capacidad de liberación depende de la concentración de entrecruzante. Las esponjas con extracto de limón previnieron el crecimiento de BF de *Pseudomonas Protegens* en al menos un 70 %, determinado por la técnica de cristal violeta. La caracterización fitoquímica del extracto se llevó a cabo mediante HPLC-DAD y HPLC-MS/MS. Por comparación con estándares de referencia se pudieron identificar flavonoides, ácidos fenólicos y carboxílicos tales como ácido cítrico, hesperidina, hesperetina, naringina, vitexina y rutina. Estos componentes han demostrado presentar actividad antimicrobiana, lo que se correlaciona con lo observado experimentalmente. Finalmente, resultados preliminares sugieren que las esponjas pueden adsorber iones. En conclusión, se obtuvieron esponjas de PVA/PDMS con extracto de limón que tienen gran potencial para actuar como filtros de agua con propiedades antimicrobianas.

PM-43 Análisis micro estructural de films de pectina con NPs para aplicaciones como envase en la industria alimentaria

Y. Illanez [1], C. Cangiano [1], J. Lambrese [1,2], C. Fernandez[1], L. Ruiz [1,3], M. Esquivel [4,5] y M. de los A. Cangiano [1,3]

[1] FICA, UNSL, Ruta 55 Ext. Norte Villa Mercedes San Luis Argentina. [2] Instituto Nacional de Tecnología Industrial, INTI San Luis, INTI, Argentina. [3] INTEQUI-CONICET, Ruta 55 Ext. Norte Villa Mercedes San Luis Argentina. [4] Centro Atómico Bariloche (CNEA - CONICET), Avenida Bustillo km 9,5, Bariloche Rio Negro Argentina. (5) UNCo-Bariloche, Quintral 1250, Bariloche Rio Negro Argentina.

En este trabajo se presenta la obtención de films a base de pectina conteniendo nanopartículas de CuNi (NPs), con propiedades antimicrobianas, como sólido activo. Las NPs se dispersaron en pectina pura para ser utilizada como recubrimiento en la industria alimentaria. El objetivo de este trabajo es mejorar la dispersión de las NPs sobre pectina. Los films de pectina pura (Pectina control) se prepararon utilizando pectina cítrica comercial 2 % p/p y glicerol 1 % p/p disueltos en agua destilada con agitación magnética a 250 rpm a 25°C. La mezcla líquida fue volcada en placas y secadas a 40°C durante 48 h. Los films con NPs se prepararon siguiendo el procedimiento de la pectina control, con la diferencia que se añadieron Nps con y sin molienda, sin molienda (Pectina + NPs) y con molienda en mortero durante 5 minutos (Pectina + NPs (molida)). Se emplearon técnicas para caracterizar los films, incluyendo difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectrometría dispersiva en energías (EDS). Los films de (Pectina + NPs) y (Pectina + NPs (molida)) fueron observados por SEM en dos modos de imagen electrones secundarios (SE) y electrones retrodispersados (BSE). Las imágenes de electrones secundarios obtenidas a bajo voltaje (2 kV) donde se obtiene una mayor contribución de electrones secundarios tipo I, muestran una superficie lisa y sin irregularidades aún a resoluciones del orden de los 500 nm. Las imágenes de electrones retrodispersados, obtenidas a mayor voltaje (10 kV) muestran la presencia de partículas de distribución irregular en ambos casos. El análisis por EDS a 5 kV y 20 kV muestra la presencia de los elementos Cu y Ni correspondientes al sólido activo. Además, se caracterizaron los elementos constituyentes de la pectina (N,O y C) y su distribución en las películas obtenidas cuyo espesor es del orden de 75.3 μm . La importancia de este estudio es su aplicación en el desarrollo de envases para protección de alimentos.

PM-44 Microscopía electrónica de barrido y técnicas asociadas (EDS, STEM) aplicadas al análisis de topografía, contraste composicional y elemental en films delgados de muestras de ciencias de la vida

*C. Weber [1], Paula López, [2], Paula Troyón [3], Alfonsina Morales [2] y Marcelo R. Esquivel [3,4]**

1 Universidad Nacional de Misiones, Posadas, Misiones, Argentina. 2 Instituto de Histología y Embriología (IHEM), Mendoza, Mendoza. 3 Depto. Caracterización de Materiales e Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, Centro Atómico Bariloche, CNEA y CONICET, Bariloche, Argentina. 4 Universidad Nacional del Comahue, Bariloche, Argentina.

La visualización de grillas con secciones de muestras biológicas por microscopía electrónica de barrido (SEM) preparadas según el protocolo para TEM (transmisión) presenta desafíos interesantes. El primer desafío con las muestras biológicas es alcanzar una buena fijación, que logre conservar las características ultraestructurales de la muestra. En este caso, las muestras fueron fijadas con soluciones, entre las que se encuentra el tetroxido de osmio (OsO_4). Luego el material se deshidrata e incluye en resina que, al polimerizar, permite cortar secciones delgadas que se montan sobre grillas de cobre. Se puede completar el protocolo con un procedimiento de contraste para destacar determinadas estructuras. En este trabajo, se caracterizan cortes delgados entre 60 y 100 nm de grosor de muestras biológicas por SEM y sus técnicas asociadas. Las muestras fueron contrastadas con citrato de plomo $\text{Pb}_3(\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7)_2$ y acetato de uranilo $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6\text{U}$. Eventualmente, los tratamientos de fijación y contraste producen efectos topográficos en la superficie del corte delgado. Este relieve es visualizado con modos de imagen de electrones secundarios (SE). Asimismo, el contraste composicional inducido por Os, U y Pb, en matrices dominadas por C, N y O, verificado por imágenes con electrones retrodispersados (BSE) y espectroscopía dispersiva en energías (EDS), es vinculado con la distribución interna de estos elementos obtenidas por microscopía electrónica de transmisión en modo de barrido (STEM). Utilizando esta técnica, las imágenes de campo claro (BF) son vinculadas con los relieves superficiales obtenidos por SE y las imágenes de campo oscuro (DF) son vinculadas con el contraste composicional obtenido con BSE. Asimismo, la distribución de Os, Pb y U analizada por EDS es vinculada con las imágenes obtenidas por difracción anular de alto ángulo (HAAD). Este trabajo pone en relieve la utilidad de las técnicas asociadas a SEM, STEM y EDS para el estudio de películas biológicas delgadas.

Sesión del Jueves 7 de Noviembre

PJ-1 Dilucidando el acoplamiento intercapa en Hetero-Bicapas de 1T/1H-NbSe₂

Roman Pico [1], Paula Abufager [1], Ignacio Hamad [1], Roberto Robles [2] y Nicolas Lorente [2]

[1] Instituto de Física de Rosario, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. Universidad Nacional de Rosario, 27 de Febrero 210 Bis (2000) Rosario, Argentina ; [2] Centro de Física de Materiales CFM/MPC (CSIC-UPV/EHU), Paseo Manuel de Lardizabal 5, San Sebastián 20018, España

Las propiedades de los materiales bidimensionales están fuertemente influenciadas por su sustrato, lo que conduce a una variedad de efectos de proximidad como apantallamiento, transferencia de carga e hibridación. Sin embargo, existe una escasez de estudios teóricos sobre estos efectos. En particular, las investigaciones teóricas previas sobre la estructura Estrella de David (SOD) en la fase 1T-NbSe₂ se han centrado en configuraciones de una sola capa o en apilamientos con la misma fase 1T, sin considerar un sustrato real. En este trabajo, nos alejamos de estos enfoques y exploramos cómo dichos efectos de proximidad influyen en las propiedades electrónicas y magnéticas de la fase 1T-NbSe₂ cuando crece sobre el sustrato metálico 1H-NbSe₂. Utilizando cálculos en el marco de la Teoría de la Funcional Densidad (DFT), establecemos un marco común para definir las características clave tanto del 1T-NbSe₂ como del 1H-NbSe₂. Posteriormente, identificamos la disposición de apilamiento óptima para estas dos capas, revelando una transferencia de carga de la fase 1T a la fase 1H, así como una reorganización de carga dentro de cada capa. Nuestros resultados indican que el momento magnético de la estructura SOD sigue siendo robusto, aunque disminuye debido a la reducción de la interacción Coulomb en las bandas de Hubbard. Además, el acoplamiento entre capas induce una metalicidad en la fase 1T y aumenta el desacoplamiento de la banda de Hubbard inferior con respecto a la banda de valencia.

PJ-2 Dispersión Inelástica Resonante de Rayos X (RIXS) en películas epitaxiales ultradelgadas de $CaMnO_3$: efectos de la tensión expansiva sobre las propiedades eléctricas y magnéticas

Joaquín Gajst [1,2,3], Juan P. Coronel [1], Thiago J. de Almeida Mori [5], Jose Santiso [4], Tulio C. R. Rocha [5], Laura B. Steren [1,2], and Federico J. Williams [2,3]

[1] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA/CONICET, 1650 San Martín, Argentina [2] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, 1033 Buenos Aires, Argentina [3] INQUIMAE, UBA/CONICET, 1428 Buenos Aires, Argentina [4] Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología, CSIC/BIST, 08193 Bellaterra, Spain [5] Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS), CNPEM, 13083970 Campinas, Br

Las manganitas son sistemas altamente correlacionados que se caracterizan por un complejo acoplamiento

to entre grados de libertad estructural, orbital, de carga y espín. En la familia $\text{La}_x\text{Ca}_{1-x}\text{MnO}_3$, el dopaje altera el llenado electrónico y, así, las propiedades eléctricas y magnéticas del material. Además, los cationes de diferentes tamaños inducen cambios en las distancias Mn-O y en los ángulos Mn-O-Mn, afectando las interacciones magnéticas de superintercambio y de doble intercambio. El CaMnO_3 (CMO) emerge como un material prometedor para dispositivos de espintrónica.

En este trabajo investigamos el efecto del estrés expansivo en las propiedades electrónicas y magnéticas de películas epitaxiales ultradelgadas de CaMnO_3 (3 nm y 30 nm de espesor) crecidas sobre sustratos $\text{SrTiO}_3(100)$ y subcapas de BaTiO_3 . El estrés surge por la diferencia entre parámetros de red de las perovskitas, y causa modificaciones en las posiciones atómicas y la formación de vacancias de oxígeno. Entonces, el efecto producido es similar al del dopaje pero restringido a la zona interfacial. Si bien las películas más delgadas experimentan un gran estrés expansivo, al aumentar el espesor se relaja la estructura cristalina a la del seno del material.

Para elucidar los efectos del estrés realizamos diversas espectroscopías: de fotoemisión por rayos X (XPS) y, con radiación de sincrotrón, de absorción de rayos X (XAS) y de dispersión inelástica resonante de rayos X (RIXS). XPS y XAS revelan una composición nominal en la superficie de las películas de 30 nm con Mn^{4+} . Sin embargo, en la interfaz se observa una reducción de los centros Mn debido a una concentración de vacancias de oxígeno. En RIXS se observan excitaciones d-d y transferencias de carga O 2p- Mn 3d. En películas de 3 nm se observa una atenuación del campo cristalino debido al aumento de la distancia Mn³⁺-O. Además, detectamos una transición intersitio eg asociada al doble intercambio, consistente con mediciones magnéticas y cálculos teóricos.

PJ-3 Meteorito Malota (a): Un enfoque multi-técnico

F. S. Gard [1], R. D. Acevedo [2], G. Arzadún[3], D. Vega[4], E. B. Halac[4]

[1]Gerencia Materiales, (CAC-CNEA), San Martín, Buenos Aires, Argentina, [2]Dep. Geología, Cristalografía i Mineralogía, Facultat de Ciències, UAB, Barcelona, Spain [3](CONICET), Laboratorio de Termocronología (LaTe Andes), Salta, Argentina [4]Departamento de Física de la Materia Condensada, GlyA-CAC, CNEA, San Martín, Buenos Aires, Argentina

Se presenta un estudio del meteorito Malota utilizando diversas técnicas analíticas. El meteorito Malota (a) se caracteriza como una condrita ordinaria H5. Su caída fue reportada el 22/06/1931, en Malota, Santiago del Estero, Argentina. La técnica de micro-espectroscopia Raman confirmó que el meteorito está alterado debido al proceso de meteorización, ya que se detectó una amplia gama de óxidos de hierro e hidróxidos. Se estima que el contenido promedio de minerales del grupo de los piroxenos (enstatita-ferrosilita) y del grupo de los olivinos (forsterita-fayalita) está en el rango de $\text{En}_{(0,85 \sim 0,80)}\text{Fs}_{(0,15 \sim 0,20)}$, y $\text{Fo}_{(0,90 \sim 0,80)}\text{Fa}_{(0,10 \sim 0,20)}$, respectivamente, de acuerdo con los valores típicos de una H5 condrita ordinaria. Además, se detectó un mineral del grupo de los feldespatos (albita-anortita) en el rango de $\text{Ab}_{0,50 \sim 0,70}\text{An}_{0,50 \sim 0,30}$.

También por micro-espectroscopia Raman, se detectó un cristal de diamante de $\sim 10 \mu\text{m}$, incrustado en una región que contiene kamacita (una aleación de hierro y níquel). La banda Raman de diamante (modo LO-TO), se detectó en $(1332 \pm 1) \text{cm}^{-1}$ con un ancho a altura media FWHM de $(3 \pm 1) \text{cm}^{-1}$, valores similares a los diamantes terrestres. Se cree que el origen del diamante es por deposición química de vapor (CVD), o por las condiciones de alta presión y temperatura dentro de un gran núcleo planetario, condiciones similares a las cuales se formaron los diamantes terrestres.

Las fases minerales en la vecindad del cristal de diamante fueron identificadas por microscopía electrónica de barrido (SEM). Además de kamacita, se detectaron minerales de sulfuro de Fe, plagioclasa, forsterita y enstatita. También los análisis SEM/EDS revelaron áreas que contenían un alto porcentaje de carbono.

La técnica de difracción de rayos X detectó también la presencia de piroxeno y olivino como los principales minerales en la muestra, confirmando los resultados obtenidos por micro espectroscopia Raman.

PJ-4 Meteorito Esquel, un peridoto Argentino olvidado: un estudio multitécnico

[1]P. E. Gaztañaga, [2]P. D. Peláez, [3]P. Z. Medina, [3]N. A. Vega, [4]R. D. Acevedo, [1]E. B. Halac, [1][5]C. P. Ramos, [1]D. Vega, [6]F. S. Gard

[1]Dept. de Física de la Materia Condensada, GlyA, CAC, CNEA, San Martín, Argentina; [2]Instituto de Tecnología Jorge A. Sabato, San Martín, Argentina; [3]Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones (LAHN), CNEA, Argentina; [4]Dep. Geología, Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), España; [5]INN, CNEA-CONICET, CAC, San Martín, Argentina; [6]Gerencia Materiales, CAC, CNEA, San Martín, Argentina.

El meteorito Esquel, una pallasita, fue descubierto en 1951 cerca de Esquel, Chubut, Argentina. Dos pequeños fragmentos ($\sim 3\text{mm}$) del meteorito fueron analizados, utilizando tomografía de rayos X, espectroscopia de fotoemisión de rayos X (XPS) y espectroscopia Raman. Luego, fueron molidos y analizados mediante espectroscopia Mössbauer. Además, una pequeña muestra ($\sim 400\ \mu\text{m}$) se analizó por difracción de rayos X de mono-cristal (SC-XRD).

La tomografía de rayos X reveló características de choque, particularmente en las fases metálicas, lo que sugiere que el meteorito puede haber experimentado eventos de impacto en su cuerpo original. La técnica de XPS proporcionó datos de la composición elemental y determinó los estados de oxidación de los elementos involucrados. Mediante espectroscopia Raman se detectaron mayoritariamente los modos vibracionales del olivino correspondientes al estiramiento simétrico y asimétrico acoplado de tetraedros de SiO_4 , observados a $\sim 823\text{cm}^{-1}$ y $\sim 854\text{cm}^{-1}$. Estos resultados indicaron una relación molar de forsterita/fayalita ($\text{Fo}_{0,9}\text{Fa}_{0,1}$).

SC-XRD identificó la estructura atómica del cristal olivino, lo que confirma también que el olivino en el meteorito es predominantemente forsterítico, con una composición de ($\text{Fo}_{0,9}\text{Fa}_{0,1}$), en consonancia con los hallazgos de la espectroscopia Raman. La espectroscopia Mössbauer identificó las fases que contienen hierro en el meteorito y proporcionó información sobre los estados de oxidación del hierro. El olivino mostró el doblete típico correspondiente a Fe^{2+} , con parámetros hiperfinos que confirmaron los resultados obtenidos mediante las otras técnicas en cuanto a la presencia dominante de Fo. Sin embargo, aunque se esperaba encontrarlas, las señales correspondientes a Fe^0 no fueron identificadas, se detectó un contenido apreciable de magnetita, revelando la completa oxidación de las fases metálicas. Este hecho probablemente es consecuencia de la corrosión terrestre. Se detectó además la presencia de troilita.

PJ-5 Estudio superficial de nanocompuestos de Ag preparados por ablación láser de pulsos ultracortos en DMSO

Janis G. Rosales Vierma [1,2], Ma. Alejandra Guerrero Vanegas[1,3], Jesica M. J. Santillán [1,2] y Valeria B. Arce [1,3]

[1] Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp), (CONICET La Plata - CIC - UNLP), 1897 Gonnet, La Plata, Buenos Aires, Argentina. [2] Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Calle 47 y 115, 1900 La Plata, Buenos Aires, Argentina. [3] Dpto. Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, UNLP, Calle 115 y 49, 1900 La Plata, Buenos Aires, Argentina.

Las propiedades físicas y químicas de los nanomateriales metálicos son de gran interés para el desarrollo de aplicaciones en diversos campos de la ciencia y la tecnología [1-3]. En particular, las nanopartículas de Ag son de gran interés por sus posibles aplicaciones en catálisis, química analítica, nanomedicina y biodetección [4].

La síntesis de nanopartículas metálicas por ablación láser de pulsos ultracortos en solución es una alternativa a los métodos tradicionales de síntesis química. En este trabajo se presenta la preparación de nanocompuestos de Ag mediante ablación láser de pulsos ultracortos, junto a un estudio de la composición química de los materiales obtenidos.

Para la síntesis de los nanocompuestos de Ag se utilizó un láser de Ti:Za de 120 fs de duración y una longitud de onda centrada en 800 nm, enfocado sobre un disco de plata [5] sumergido en el solvente orgánico dimetilsulfóxido (DMSO). La energía del pulso láser utilizada fue de 500 μJ .

La caracterización de la composición química se realizó mediante el análisis computacional de la respuesta óptica de los nanocompuestos preparados. Para esto se simuló el espectro de extinción de las distintas especies de partículas formadas en la síntesis mediante la implementación de algoritmos de aproximación de dipolo discreto (DDA) y teoría de Mie. En el análisis de la respuesta óptica se consideró la posibilidad de que en el proceso de síntesis se formen partículas de Ag y Ag₂S, con cubiertas de Ag₂O, carbono y Ag₂S en distintas proporciones según la cantidad de DMSO utilizado en la síntesis. Por otro lado, los nuevos materiales fueron caracterizados por Espectroscopía de Absorción Óptica (OAS), plasma de acoplamiento inductivo (ICP), Espectroscopía Micro-Raman (MRE) y Microscopía de Transmisión Electrónica de Alta Resolución (HRTEM).

Los resultados computacionales obtenidos dan un buen ajuste con la caracterización experimental realizada permitiendo identificar la composición del nanocompuesto preparado.

Referencias

- [1] O.V. Salata, Applications of nanoparticles in biology and medicine, *J. Nanobiotechnol.* 2 (2004) 1–6.
- [2] E. Gazit, Self-assembled peptide nanostructures: the design of molecular building blocks and their technological utilization, *Chem. Soc. Rev.* 36 (2007) 1263–1269.
- [3] A. Kinkhabwala, Z. Yu, S. Fan, Y. Avlasevich, K. Müllen, W.E. Moerner, Large single-molecule fluorescence enhancements produced by a bowtie nanoantenna, *Nat. Photonics* 3 (2009) 654–657.
- [4] Pilot R, Signorini R, Durante C, Orian L, Bhamidipati M, Fabris L. A Review on Surface-Enhanced Raman Scattering. *Biosensors (Basel)*. 2019 Apr 17;9(2):57.
- [5] Arce, V. B. et al., *J. Phys. Chem. C*, 2017, 121, 10501–10513.

PJ-6 Investigando el rol del grafeno en la formación y estabilidad de islas de antimoneno en la fase beta

M. Guadalupe Gómez-Farfán [1,2,3], L. Avilés-Félix [1,2,4], Esteban D. Cantero [1,2,3], Esteban A. Sánchez [1,2,3], Laura N. Serkovic-Loli [1,2,5]

[1] Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Bariloche [2] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, Nodo Bariloche, CNEA-CONICET, Bariloche [3] División Física de Superficies, CAB, Bariloche [4] División Resonancias Magnéticas CAB, Bariloche, [5] CRUB Universidad Nacional del Comahue, Bariloche

Los materiales bidimensionales han mostrado un tremendo potencial para diversas aplicaciones tecnológicas. Particularmente, el antimonio bidimensional presenta una alta aplicabilidad en electrónica, sensores y baterías. Este material 2D, conocido como antimoneno, presenta dos fases estables: alfa (estructura rectangular) y beta (estructura panal de abeja), cuya formación depende del sustrato en el que se deposite el antimonio. En este estudio, investigamos el crecimiento de islas de antimoneno sobre grafeno, formando una heteroestructura de antimoneno/grafeno. Para demostrar la importancia del grafeno en la síntesis del antimoneno, también estudiamos el antimonio depositado sobre una lámina de cobre, similar a la utilizada como sustrato en el grafeno. El antimonio exhibe la estructura de antimoneno en la fase beta cuando se deposita sobre grafeno monocapa, pero no cuando se deposita sobre una lámina de cobre, ni sobre grafeno multicapa. Además, investigamos la estabilidad de la heteroestructura después de la exposición al aire. Se forman islas de antimonio puro cuando se evapora en alto vacío sobre sustratos de grafeno y cobre, y los átomos de antimonio se oxidan al exponerse al aire. Tras recocer la muestra en ultra-alto vacío a temperaturas inferiores a 200 °C, se recupera más de la mitad del antimonio puro y casi todo el antimonio oxidado se desorbe del sustrato de grafeno. En contraste, casi nada del antimonio oxidado se desorbe del sustrato de cobre, lo que resalta el papel clave del grafeno en la formación y estabilidad del material 2D depositado.

PJ-7 Cómo afectan los defectos atómicos las propiedades electrónicas de superconductores basados en Fe

Jazmín Aragón Sánchez[1], María Lourdes Amigó[1], Gladys Nieva[1], Elena Salagre[2], Adrián García-Martín[2], Pilar Segovia[2], Enrique García Michel [2], Julio Gayone[1], and Yanina Fasano[1]

[1] Centro Atómico Bariloche Instituto Balseiro, Bariloche, Argentina; [2] Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, España

Las propiedades físicas de los superconductores basados en Fe nos brindan la posibilidad de estudiar con gran sensibilidad cómo los defectos a escala atómica afectan las propiedades electrónicas en la superficie de las muestras, un tema que es de interés general en la ciencia de materiales. Adicionalmente, en el caso de superconductores este tema brinda información relevante para entender la conexión entre la naturaleza y concentración de defectos atómicos con la temperatura crítica hasta la que el material puede presentar resistencia nula. En la familia de superconductores basados en Fe, el compuesto FeSe ha capturado la atención de la comunidad científica debido a su sencilla estructura

cristalina compuesta por un apilamiento de planos de Fe con átomos de Se levemente desplazados hacia arriba y abajo. A pesar de esta sencillez en la estructura, las propiedades electrónicas de los superconductores basados en Fe son fuertemente afectadas por deformaciones de la estructura cristalina introducidas mediante dopaje o aplicación de presión. En este trabajo presentaré resultados experimentales que nos permitieron dilucidar que los defectos atómicos del tipo mancuerna, visualizados directamente con microscopía túnel de barrido, alteran el espectro de niveles electrónicos de core en la superficie de las muestras. Mediante simulaciones de density functional theory mostramos el buen acuerdo cuantitativo entre la modificación de las nubes electrónicas de los átomos en el entorno de estos defectos y la forma espectral de los niveles electrónicos de core en estos compuestos. Adicionalmente, discutiré cómo en los defectos del tipo mancuerna se produce una modificación estructural que explicaría el dramático deterioro de la superconductividad cuando estos defectos proliferan.

PJ-8 Estructura electrónica en la nanoescala mediante espectroscopía de pérdida de energía de electrones y microscopía filtrada en energía. Ahora una realidad en Argentina

M. Sergio Moreno [1]

[1] INN, CNEA-CONICET-CAB, San Carlos de Bariloche 8402, Argentina

La espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS) es una técnica mediante la cual los materiales son estudiados a través de las pérdidas de energía ocasionadas por las interacciones inelásticas con el haz de electrones. Cuando se efectúa en un TEM provee un cúmulo de información, en forma de espectros e imágenes filtradas en energía (EFTEM), que permite establecer una correlación entre microestructura, nanoquímica y propiedades electrónicas con resolución subnanométrica o atómica. La combinación de alta resolución espacial y en energía hace que EELS efectuada en el TEM sea una de las espectroscopías de estado sólido más poderosas, siendo esencial en el estudio de materiales nanoestructurados (1D, 2D).

Las pérdidas de energía típicas que son detectadas en el TEM varían desde el infrarrojo al régimen de rayos X blandos (0-3 keV). La resolución en energía puede variar desde ~ 10 meV a 1 eV, según el microscopio utilizado. El espectro de pérdidas de carozo contiene información sobre la estructura electrónica del material e información química sobre la composición y el estado de enlace químico (valencia), equivalente a la obtenida mediante XAS en un sincrotrón. Las imágenes obtenidas para un borde de absorción específico proveen la distribución espacial de ese elemento (mapa elemental). Es muy importante notar que esta espectroscopía puede aplicarse a todos los elementos de la tabla periódica, siendo especialmente adecuada para la detección de elementos livianos.

Desde 2019 se encuentra instalado el primer espectrómetro de pérdida de energía del país, acoplado al FEG-TEM de Bariloche. Por ello, esta presentación pretende difundir esta espectroscopía y microscopía filtrada, para lo cual se ejemplifican posibles aplicaciones de la misma. Estos ejemplos incluyen mapeo químico con distintas resoluciones espaciales, estructura electrónica y microestructura, con aplicaciones en catalizadores, biología y el mapeo de grupos funcionales en óxido de grafeno (GO).

PJ-9 Superconductividad de superficie en el semimetal de Weyl t-PtBi₂

Yanina Fasano, [1] Sebastian Schimmel,[2] Sven Hoffmann,[2] Julia Besproswanny,[2] Laura Teresa Corredor Bohorquez,[3] Joaquín Puig,[1] Bat-Chen Elshalem,[4] Beena Kalisky,[4] Grigory Shipunov,[3] Danny Baumann,[3] Saicharan Aswartham,[3] Bernd Büchner,[3] Christian Hess[2] Yanina Fasano

[1] Centro Atómico Bariloche Instituto Balseiro, Bariloche, Argentina; [2] Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Alemania, [3] IFW Leibniz Institute, Dresden, Alemania, [4] Bar Ilan University, Ramat Gan, Israel

El avance de la computación cuántica despierta el interés de generar qubits tolerantes a fallas, y la superconductividad topológica es un concepto muy prometedor para alcanzar este objetivo. Los primeros logros experimentales estudian sistemas híbridos, así como materiales intrínsecamente topológicos o superconductores, presentando esta fenomenología a temperaturas muy bajas. Sin embargo, las temperaturas críticas más altas son indispensables para la explotación tecnológica de estos materiales en computación cuántica. Los prometedores resultados recientes de espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES) revelan que la superconductividad del semimetal trigonal de Weyl de tipo I PtBi₂ (t-PtBi₂) se encuentra en los estados superficiales de los arcos de Fermi, lo que hace que t-PtBi₂ sea un candidato para la superconductividad topológica intrínseca. Aquí mostramos, utilizando microscopía y espectroscopía de efecto túnel de barrido (STM/STS) que t-PtBi₂ presenta superconductividad superficial a temperaturas elevadas (5 K). La magnitud del gap superconductor es espacialmente no homogénea y varía entre 0 y 20 meV. Estos valores del gap superconductor, y la forma del espectro de excitación de cuasipartículas se asemejan a la fenomenología de los superconductores de alta T_c. Hasta donde sabemos, este es el gap superconductor más grande medido hasta ahora en un material topológico. Además, demostramos que el estado superconductor a 5 K persiste hasta un campo magnético de 12 T. Por lo tanto, demostramos que t-PtBi₂ es un candidato principal para la superconductividad topológica intrínseca a temperaturas, campos y magnitudes de gap superconductor tecnológicamente relevantes.

PJ-10 Visualización de nanocristales de vórtices para detección de anisotropías en el parámetro de orden superconductor

J. Puig [1,2,3], N. R. Cejas Bolecek [1,2,3], J. Aragón Sanchez [1,2,3], M. I. Dolz [4], M. Konczykowski [5], Y. Fasano [1,2,3]

[1] Low Temperatures Lab, Centro Atómico Bariloche, CNEA, Argentina. [2] INN, CONICET-CNEA, Bariloche, Argentina. [3] Instituto Balseiro, CNEA and Universidad Nacional de Cuyo, Argentina. [4] Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis and CONICET, Argentina. [5] Laboratoire des Solides Irradiés, Ecole Polytechnique, France

Hemos estudiado la orientación de planos compactos de la estructura de nanocristales de cientos de vórtices nucleados en muestras micrométricas de superficie cuadrada del superconductor de alta temperatura crítica Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+y}. Las muestras de forma cuadrada se fabricaron de manera de que sus lados sean paralelos a la dirección nodal o antinodal del parámetro de orden superconductor tipo d-

wave. Al aplicar campo magnético obtenemos capturas de la estructura de vórtices nucleada luego de un proceso de field-cooling y observamos que independientemente de la orientación de la orientación del borde de la muestra la red de vórtices siempre presenta una familia de planos compactos paralelos a la dirección antinodal. Más aún, hemos observado que la estructura de vórtices presenta una deformación a lo largo de esta dirección de manera que la estructura se encuentra comprimida en esa dirección respecto a los esperado para una red de Abrikosov. Esta deformación disminuye continuamente en magnitud al aumentar el número de partículas. Discutimos estos resultados en base a una interacción anisotrópica con origen en la anisotropía del parámetro de orden superconductor la cual es puesta en evidencia en muestras micrométricas prístinas. De esta manera presentamos un método novedoso para la determinación de anisotropías en el parámetro de orden superconductor.

PJ-11 Zirconia estabilizada con itria mesoporosa para electrodos SOFC/SOEC: rol del surfactante en las propiedades fisicoquímicas y texturales

E.M. Sánchez Faba [1,2], M. Melone [1,2], H.E. Troiani [1], C.M. Chanquía [1,2], L.V. Moggi [1,2] y E.G. Vaschetto [3]

[1] Departamento Caracterización de Materiales (DCM-CAB-CNEA), Gerencia Investigación Aplicada, Gerencia de Área Investigación, Desarrollo e Innovación, Centro Atómico Bariloche, Argentina; [2] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (UE-INN Nodo Bariloche, CNEA-CONICET), Argentina; [3] Centro de Investigación y Tecnología Química (CITeQ-CONICET-UTN), Facultad Regional Córdoba, Argentina

Los cermet metal-cerámicos son electrocatalizadores para la oxidación o síntesis de combustibles en pilas y electrolizadores de alta temperatura (SOFC/SOEC). La zirconia estabilizada con itria (YSZ) es el soporte cerámico ideal por su alta conductividad iónica, excelente estabilidad (mecánica, química y térmica) y bajo costo. Desde esta perspectiva, la YSZ debe presentar gran superficie específica y porosidad (20 a 40 %) que permitan la infiltración de la fase metálica durante el conformado del electrodo, y la difusión de gases hacia y desde los puntos triples metal-cerámico-gas (TPB) para una mayor eficiencia de las reacciones electroquímicas.

Es posible sintetizar la YSZ con una mesoporosidad controlada mediante el uso de surfactantes, como el CTAB. No obstante, estos tensoactivos son costosos, requieren tratamientos térmicos prolongados con alto consumo energético, y pueden liberar compuestos tóxicos al quemarlos (ej. NO_x). Estas desventajas limitan su viabilidad para aplicaciones a escala industrial.

En este trabajo, se ensayó la síntesis de precursores mesoporosos de YSZ (8 % molar Y₂O₃) por un método sol-gel, utilizando monoestearato de glicerilo y glicerol como surfactantes de origen renovable y ambientalmente amigables. Este enfoque permitió bajar la demanda energética al reducir la temperatura y el tiempo de síntesis, no requiere el uso de gases en el tratamiento térmico, y los productos liberados son menos nocivos.

Los cerámicos obtenidos por este método mantuvieron la estructura cristalina: los patrones de DRX de los polvos evidenciaron la fase cúbica tipo fluorita Fm-3m, con cristalitas pequeñas (~6 nm) y un parámetro de red de 5,14 Å (método de Rietveld). La existencia de una mesoporosidad interparticular se comprobó mediante microscopía TEM. El estudio de las propiedades texturales de los polvos de partida se completa con isotermas de adsorción/desorción de N₂, y de los soportes cerámicos por microscopía SEM tras sinterizarlos a alta temperatura (>1000 °C).

PJ-12 Propiedades electrónicas del l-triptófano adsorbido en MXenos Ti_3C_2Tx ($T=O$)

M. Esteves [1], L. Fernandez-Werner [1], L. Amy [2], M. Kieninger [3], O.N. Ventura [3] y R. Faccio [1]

[1] Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[2] Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[3] Computational Chemistry and Biology Group, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

Los MXenos son una gran familia de materiales bidimensionales similares al grafeno que ha sido desarrollada en los últimos años, compuestos por carburos, nitruros y carbonitruros de metales de transición [1]. Presentan estructuras en monocapas con propiedades físicas y químicas excepcionales, que pueden ajustarse variando los grupos terminales de las superficies. En este trabajo, se evalúa el efecto de la saturación de oxígeno en la reactividad de las superficies de Ti_3C_2 mediante el modelado por primeros principios de monocapas de $Ti_3C_2O_x$ $x=1$ o 2 [2]. Ambas superficies presentan un carácter metálico y las funciones de trabajo muestran una mayor reactividad en el caso de la estructura que presenta deficiencia de oxígenos superficiales. Para evaluar más a fondo la reactividad de la superficie, se estudió el modelo de aminoácido l-triptófano. Se obtuvieron las configuraciones estables de la molécula adsorbida y se encontraron los aductos más estables para Ti_3C_2O .

En el caso de $Ti_3C_2O_2$, se produce fisiorción mientras que en el caso de Ti_3C_2O , se adopta la configuración de quimisorción bidentada disociativa. Se determinaron las diferencias en la absorbancia óptica y la energía de la función de trabajo como un paso preliminar hacia la evaluación de estas estructuras como posibles dispositivos de detección de dicho aminoácido.

[1] Gogotsi, Y., & Anasori, B. (2019). The rise of MXenes. *ACS nano*, 13(8), 8491-8494.

[2] Fernández-Werner, L., Esteves, M., Amy, L., Kieninger, M., Ventura, O. N., & Faccio, R. (2024). Electronic properties of l-tryptophan adsorbed on $Ti_3C_2T_x$ ($T=O$) MXenes. *MRS Advances*, 9(2), 101-107.

PJ-13 Estudio estructural y electrónico de nanoláminas ultrafinas derivadas de $HNaTi_2O_5$ y $K_2Ti_2O_5$

L. Fernández-Werner [1], M. Esteves [1], R. Faccio [1]

[1] Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay

Los titanatos laminares de la serie $A_2Ti_mO_{2m+1}$ (con $m=1-9$, y A metales alcalinos y/o hidrógeno) han sido ampliamente estudiados por sus excepcionales propiedades de intercambio iónico [1]. Recientemente, estos materiales han ganado atención por su potencial uso en baterías de iones de litio y de iones de sodio [2,3]. Sin embargo, aún persisten varias preguntas sobre su papel como fases estructurales en nanotubos de titanatos y nanoestructuras sintetizadas mediante métodos hidrotermales. Este estudio aborda algunas de esas interrogantes investigando las propiedades estructurales, electrónicas y vibracionales de nano láminas ultradelgadas derivadas de $HNaTi_2O_5$ y $K_2Ti_2O_5$.

La estructura derivada de HNaTi_2O_5 forma láminas ultrafinas de TiO_2 de tipo lepidocrocita, mientras que la estructura derivada de $\text{K}_2\text{Ti}_2\text{O}_5$ consiste en nano láminas de dititanato de hidrógeno penta-coordinado. Estas estructuras cristalográficas distintas conducen a comportamientos electrónicos y propiedades vibracionales únicas. Se presentan y analizan las diferencias significativas entre estos dos sistemas.

Se realizaron cálculos de primeros principios utilizando el código VASP [4], con una corrección de Hubbard (Ueff) aplicada para modelar con precisión las interacciones electrón-electrón en los estados d del Ti, siguiendo el enfoque de Dudarev et al. [5]. El análisis de fonones confirmó la estabilidad y la naturaleza de mínimo local de las estructuras propuestas.

Ref.

[1] Mitsuru, S. et al. Bull. Chem. Soc. Jpn., 1990. 63(7), 1978.

[2] Tian, Q. et al. J. Alloys Compd., 2017. 699, 540.

[3] Zarrabeitia, M., et al. J. Power Sources, 2016. 324, 378.

[4] Kresse, G. et al. Phys. Rev. B, 1996. 54(16), 11169.

[5] Dudarev, S.L., et al. Phys. Rev. B, 1998. 57(3), 1505.

PJ-14 **pyFitXPS: una herramienta de código abierto en Python para el análisis de espectros XPS y UPS**

J. Azcárate

Física de Metales, Centro Atómico Bariloche (CAB), Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) - CONICET

Existen diversos programas para ajustar espectros de emisión de fotoelectrones, como CasaXPS, IgorPro, XPSpeaks y AAnalyzer. Los dos primeros requieren licencias costosas, mientras que los otros dos son gratuitos. Todos estos programas son compatibles únicamente con Windows, excepto IgorPro, que también funciona en MacOS. Ninguno está disponible para Linux. De estos cuatro, solo IgorPro permite programación con un lenguaje propio, mientras que los demás son "cajas negras" sin acceso al código fuente.

En contraste, los programas basados en Python pueden ejecutarse en cualquier sistema operativo e interactuar con otros programas. Además, los Notebooks como Jupyter permiten ejecutar código Python junto con texto enriquecido.

Este proyecto tiene como objetivo desarrollar un entorno para ajustar espectros de emisión de fotoelectrones (XPS, UPS) basado en Python, enfocado especialmente en espectros seriados como perfiles de profundidad o estudios de daño por irradiación. Se han creado scripts para leer archivos XY (.xy) exportados del software SpecLabs Prodigy y manejarlos como diccionarios. Los diccionarios en Python son objetos útiles para alojar datos, donde cada elemento está formado por un par 'key:value'. En 'value' se pueden alojar objetos como tablas, listas o arreglos de datos, y acceder a ellos mediante la 'key' asociada. Así, un diccionario puede contener un solo espectro o un conjunto completo de muchos espectros.

También se han desarrollado funciones para ajustar el borde de Fermi u otro pico de referencia, y corregir la escala de energía. Los ajustes se realizan usando el paquete LMFIT de Python. Además, se utilizan proyectos existentes que han portado funciones de ajuste ampliamente usadas en IgorPro, como el procedimiento XPSDoniach.

Este proyecto está en desarrollo, es de código abierto y se encuentra alojado en el repositorio <https://github.com/JulioAzcarate/pyFitXPS>. Se invita a todos a usarlo y contribuir a futuras mejoras.

PJ-15 Gas de electrones bidimensional en SrTiO₃ (001): Influencia de a relajación superficial y de las vacancias de oxígeno en su formación

Manuel González Rodríguez Díez [1,2]*; y Ruben Weht [1,2]

[1] Departamento Física de la Materia Condensada, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Buenos Aires, Argentina; [2] Instituto de Tecnología Jorge Sabato, Universidad Nacional de San Martín (UNSAM)-CNEA, Buenos Aires, Argentina

En este trabajo estudiamos, utilizando códigos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), la influencia de la relajación superficial (*rumpling*) y de las vacancias de oxígeno en las propiedades del gas de electrones bidimensional (2DEG) formado en la superficie SrTiO₃(001). Para ello se analizaron tanto superficies simples, con terminaciones SrO y TiO₂, como una que presenta una reconstrucción 2 × 2. Se estudiaron los sitios preferenciales para las vacancias de oxígeno, su influencia sobre el diagrama de bandas, analizando la difusión de las mismas (barreras y caminos), y los orbitales participantes en la conducción. Encontramos que las capas de menor energía para las vacancias son relativamente independientes de la terminación en los sistemas no reconstruidos (siendo la superficie el sitio más favorable y la segunda capa el de menor probabilidad). Aun así existe influencia sobre las barreras energéticas durante la difusión hacia el volumen, donde se ve que el sistema terminado en TiO₂ presenta mayores barreras para el desplazamiento de los defectos. También en esta última terminación vimos que las energías de formación de vacancias suelen ser menores que en la de SrO. Se realizaron, además, simulaciones para comparar estos movimientos con la migración superficial. Hallamos que no solo es importante considerar el efecto de las vacancias a la hora de explicar la formación del 2DEG, sino que también es necesario tomar en cuenta la separación en la dirección perpendicular a la superficie que ocurre en los sistemas relajados, donde los Sr/Ti se alejan del plano de los oxígenos.

PJ-16 Análisis por TOF-SIMS de superficies e interfaces de óxidos de metales de transición que alojan gases de electrones 2D

A. Lucero Manzano [1,4], E.A. Martínez [2], E.D. Cantero [3], O. Grizzi [1], E.A. Sánchez [3], F.Y. Bruno [2]

[1] Gerencia de Física, Centro Atómico Bariloche, Argentina, [2] GFMC, Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, España, [3] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Nodo Bariloche, Argentina, [4] Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Cuyo, Argentina

En 2004, el descubrimiento de un gas de electrones 2D (2DEG) en la interfaz $LaAlO_3/SrTiO_3$ generó una intensa investigación para revelar su origen, las propiedades complejas y sus posibles aplicaciones. Más tarde, se encontraron 2DEG en interfaces de otros óxidos de metales de transición (TMO), como $KTaO_3$, que se convirtió en un sistema prometedor con propiedades relevantes como superconductividad, ferromagnetismo, efecto Rashba considerable y transporte eléctrico anisotrópico.

Se desarrollaron diferentes procedimientos para crear dichos sistemas (deposición de películas reductoras, irradiación UV, bombardeo iónico). Actualmente, existe consenso en que las vacancias de oxígeno (Ov) formadas cerca de la superficie del TMO son cruciales en la formación del 2DEG, actuando como donadores de electrones.

Aquí utilizamos TOF-SIMS y otras técnicas de superficies para determinar la extensión de la región de la interfaz con Ovs, y presentamos un nuevo procedimiento para formar 2DEGs basados en TMOs. Éste consiste en depositar una capa delgada de AlF_3 en la superficie de un TMO, seguido de bombardeo electrónico a baja energía (0.1 – 2 keV) para formar el 2DEG. El bombardeo electrónico disminuye la cantidad de F, permitiendo control preciso de la cantidad de Al que toma O desde el TMO (generación de OVs). Una nueva deposición de AlF_3 actúa como capa protectora.

Primero presentamos perfiles TOF-SIMS de superficies de $KTaO_3$ sometidas a diferentes temperaturas y ciclos de sputtering de Ar. Se analizan las variaciones en el contenido de O y K con la profundidad. Luego mostramos perfiles de composición de la heteroestructura $Si_3N_4/Al/KTaO_3$ con un 2DEG en la interfaz $Al/KTaO_3$, siendo el Si_3N_4 una capa de protección. Finalmente, evaluamos la eficiencia del AlF_3 bombardeado con electrones para producir las vacancias de oxígeno en el TMO. Además, comparamos el método sobre sustratos sin O para cuantificar la capacidad de extracción de O de la capa de AlF_3 .

PJ-17 Campos eléctricos de plasmones en nanocavidades cilíndricas inducidas por distribuciones de carga dependientes del tiempo.

Silvina Segui [1], Nestor R. Arista [2], Juana L. Gervasoni [2, 3]

[1] IFEG (CONICET-UNC) Córdoba, Argentina; [2] Centro Atómico Bariloche (CNEA) e Instituto Balseiro (CNEA-UNCu). S. C. de Bariloche, Argentina; [3] CONICET; Argentina.

El propósito de esta comunicación es investigar la interacción de fuentes externas dependientes del tiempo con los modos de plasmón inducidos en una cavidad cilíndrica de dimensiones nanoscópicas. Usamos el modelo hidrodinámico para describir las propiedades del plasmón del material y resolvemos la ecuación de Poisson para obtener los campos inducidos. Consideramos diferentes configuraciones de las fuentes externas (carga puntual, distribución de carga extendida y dipolo eléctrico), con dos tipos de dependencia del tiempo: decaimiento exponencial y oscilaciones armónicas. Analizamos la mejora de la intensidad del campo en función de la distancia a la fuente dentro de la cavidad, en comparación con la intensidad obtenida en el vacío.

PJ-18 Caracterización estructural, superficial y magnética del nano-óxido

$\text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{Cr}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_{3-\delta}$ tipo perovskita

Corina Chanquía [1,2], Víctor Galván [3], Silvina Bengió [4] y Paula Bercoff [3]

[1] Departamento Caracterización de Materiales, Gerencia Investigación Aplicada, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), San Carlos de Bariloche [2] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), CABA [3] Instituto de Física Enrique Gaviola – CONICET, FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba [4] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (UE: CNEA-CONICET) –Nodo Bariloche

Se presenta un estudio estructural, superficial y magnético del óxido nanoestructurado $\text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{Cr}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCM), el cual fue sintetizado por el método de combustión. Para caracterizarlo se usó difracción de rayos X, fisisorción de N_2 , reducción térmica programada, microscopía electrónica, dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS1 - LNLS), difracción de neutrones (D20 - ILL), espectroscopía de fotoelectrones excitados con rayos X y magnetometría. Por refinamiento Rietveld se obtuvo un buen ajuste del patrón de DRX con el sistema trigonal/romboédrico del grupo espacial R-3c. El material LSCM consiste en nanocristalitas ~ 30 nm levemente aglomeradas formando una estructura tipo esponja con meso- y macro-porosidad: el área superficial específica ronda los $10 \text{ m}^2/\text{g}$ y el diámetro de poro los 40 nm. Por difracción de neutrones se detectaron dos fases minoritarias $< 3\%$, MnCr_2O_4 y Mn, las cuales no se aprecian por DRX. Mediante XPS se caracterizó el pico $\text{Mn}2p$, que muestra una estructura electrónica en $\text{BE} \approx 624.5 \text{ eV}$, compatible con la presencia de $\text{Mn}^{4+}/\text{Mn}^{3+}$. Por otro lado, el pico de $\text{Cr}2p$ muestra una componente principal a $576,8 \text{ eV}$, compatible con la presencia de Cr^{3+} . Además, se evidenció una componente minoritaria a $\text{BE} \sim 580,5 \text{ eV}$, de acuerdo con trazas de SrCrO_4 . El pico de $\text{La}3d$ es compatible con la presencia de La^{3+} , al igual que en La_2O_3 , mientras que el pico $\text{Sr}3d$ presenta una componente mayoritaria asociada con la presencia de Sr^{3+} y otra menor asociada a la presencia de Sr^{2+} (posiblemente como SrO), de acuerdo con lo observado para el pico del $\text{Cr}2p$. Los ciclos de histéresis medidos a distintas temperaturas mediante magnetometría muestran dos contribuciones: una paramagnética y una ferromagnética, esta última con una temperatura de Curie alrededor de los 150 K y coercitividad por debajo de 1 kOe, de acuerdo con los tamaños de cristalitas observados.

PJ-19 Teoría basada en singletes de polaron para excitaciones ópticas de baja energía en NiPS_3

C. S. Helman[1], I.J. Hamad[2], L. O. Manuel[2], A. E. Feiguin[3], A. A. Aligia[1]

[1] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Argentina. [2] Instituto de Física Rosario (CONICET) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Argentina [3] Physics Department, Northeastern University, Boston, USA

Desarrollamos una teoría que explica las excitaciones ópticas de baja energía cercanas a 1.5 eV observadas en experimentos ópticos en NiPS_3 . Utilizando métodos *ab initio*, construimos un modelo

de Hubbard de dos bandas para dos orbitales efectivos de Ni. El salto efectivo dominante corresponde a los terceros vecinos más cercanos. Este modelo exhibe excitaciones triplete-singlete de energía con valores casi el doble de la energía de intercambio de Hund. Derivamos un modelo efectivo para el movimiento de dos singletes en un fondo antiferromagnético, que resolvemos utilizando una aproximación autoconsistente generalizada de Born, desentrañando la naturaleza de estas nuevas excitaciones, que se mueven coherentemente como "polarones singletes".

PJ-20 Estudio de la estructura electrónica de la fase cúbica del semimetal topológico $PtBi_2$ mediante Espectroscopía de fotoemisión y DFT.

Silvina Bengió[1], Víctor Correa[1], Jorge Facio[1], Daniel Domínguez[1], Pablo Pedrazzini[1], Paolo Moras[2], Elena Salagre[3], Pilar Segovia[3] and Enrique García Michel [3]

[1] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (Conicet), Centro Atómico Bariloche and Instituto Balseiro, 8400 Bariloche, Argentina [2] Istituto di Struttura della Materia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, I-34149 Trieste, Italy [3] Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

La estructura electrónica de la fase cúbica del semimetal topológico $PtBi_2$ se abordó mediante un detallado análisis de los niveles internos $Bi4f$, $Pt4f$ y $Bi5d$, y de la banda de valencia integrada usando fotoemisión. Sobre la superficie (111) preparada in situ por clivado a bajas temperaturas (9K) se identificó una única componente en el espectro del nivel $Bi4f$, que coincide con la referencia de Bi puro, y una única componente en el espectro de nivel $Pt4f$, que está más ligada en 0.5eV respecto de la referencia de Pt puro. Atribuimos este comportamiento a cambios en la estructura electrónica de valencia asociada al enlace covalente Pt-Bi. Los espectros de la banda de valencia integrados en momento muestran un buen acuerdo con los cálculos relativistas basados en la teoría de funcional densidad (DFT), lo que indica que la estructura electrónica de volumen está representada de manera adecuada. Se estudió el nivel $Bi5d$ en el régimen de bajas energías cinéticas en condiciones de emisión normal y fuera de emisión normal, el cual muestra una sola componente pero con un ancho menor en el último caso, lo cual sugiere que la superficie está enriquecida en Bi. Finalmente analizamos el impacto de diferentes métodos de preparación de la superficie, tales como clivado in situ a temperatura ambiente y mediante sputtering/annealing. Allí se genera una fase extra que podemos atribuir principalmente a efectos de la temperatura, la cual promueve la formación de vacancias de Bi. La sensibilidad con la forma de preparación superficial debido a los efectos de la temperatura es indicativo de una fuerte reconstrucción electrónica resultante de la ruptura de enlaces covalentes, lo que subraya el delicado equilibrio de las interacciones que rigen la estructura electrónica superficial.

PJ-21 Efecto de la proximidad con metales y sistemas magnéticos sobre la velocidad crítica de vórtices en microalambres de NbN

J. Zapata Ceballos [1, 2] y N. Haberkorn [1, 2]

[1] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Nodo Bariloche, S. C. de Bariloche, RN 8400, Argentina; [2] Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, and Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 San Carlos de Bariloche, Argentina

En este trabajo se presenta un análisis de la velocidad crítica de vórtices en nanoalambres de NbN a través de curvas corriente-voltaje. Se compara el impacto de la proximidad con metales no magnéticos, como aluminio y niobio, y con la aleación ferromagnética Fe-Ni sobre los mecanismos de disipación en microcircuitos con una longitud de 40 micrones, un ancho de 5 micrones y espesores de NbN de 5 y 10 nm. El efecto de proximidad fue generado mediante el crecimiento de una lámina delgada en la superficie del material superconductor. Los resultados indican que, en todos los casos, la proximidad con otros sistemas conductores suprime la temperatura crítica del NbN, siendo más crítico para sistemas ferromagnéticos. Por otro lado, utilizando el modelo de Larkin-Ovchinnikov y mediante el análisis de la velocidad crítica de los vórtices en función del campo magnético, se observa que existe un impacto mínimo sobre la misma, independientemente de la naturaleza del material utilizado. Los resultados se discuten analizando el efecto de la interfaz sobre el tiempo de recombinación de electrones en pares de Cooper en el NbN.

PJ-22 Topografía y análisis químico en semimetales Weyl de tipo II TaIrTe₄ y TaRhTe₄

A. Cruz-García [1], J.E. Gayone [1,2], S. Aswarthan [3], B. Büchner [3], Yanina Fasano [1,2]

[1] Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA - CONICET, Nodo Bariloche, Av. Bustillo 9500, 8400, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina. [2] Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Av. Bustillo 9500, 8400, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina. [3] IFW Leibniz Institute, Dresden, Alemania.

La búsqueda de superconductividad no convencional en materiales semimetálicos de Weyl es actualmente una actividad cautivadora, ya que estas fases superconductoras podrían ser topológicamente no triviales y albergar modos exóticos de Majorana [1]. Los materiales en capas de van der Waals son especialmente prometedores en este contexto, debido a sus propiedades físicas únicas [1-5]. En este estudio, investigamos los compuestos de van der Waals TaIrTe₄ y TaRhTe₄ utilizando espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) y microscopía túnel de barrido (STM). Se empleó STM para analizar la topografía con resolución a escala atómica en las superficies de muestras clivadas in situ en condiciones de ultra alto vacío. A partir del análisis del corrimiento en energía de los picos del espectro de XPS se encontró que para ambos compuestos los átomos de Te ganan electrones mientras que los de Ta actúan como donantes de electrones. Además, los elementos de Ir y Rh donan electrones también para ambos compuestos.

PJ-23 Estudio teórico de las propiedades electrónicas del siliceno mediante métodos ab initio

J. Gelabert [1], J. Villarreal [2,3], C. Helman [4]

[1] Instituto Balseiro (UNCUYO-CNEA), Argentina; [2] Departamento de Física (UNS), Argentina; [3] Instituto de Física del Sur (IFISUR-CONICET), Argentina; [4] División de Física de Superficies (CAB), Argentina

Se realizó un estudio teórico de las propiedades electrónicas de siliceno pristino mediante cálculos basados en la teoría funcional de la densidad (DFT). Considerando el acoplamiento espín-órbita, se obtuvo la estructura de bandas y se compararon las bandas cercanas al nivel de Fermi con aquellas obtenidas para el hamiltoniano teórico de Kane y Mele en la aproximación de bajas energías.

Se calculó la densidad de estados proyectada en los orbitales atómicos. Se graficó la densidad de carga electrónica y se generaron imágenes de microscopía túnel de barrido (STM) del interior de la monocapa.

Se realizó una Wannierización de la monocapa de siliceno utilizando diez orbitales polarizados en espín. Dichos orbitales se graficaron en el espacio real. A su vez, se compararon las bandas generadas por el código ab initio con aquellas obtenidas por interpolación de Wannier y se mostró la contribución de cada uno de los orbitales de Wannier a la estructura de bandas.

Los resultados muestran que el siliceno tiene un comportamiento similar al grafeno en cuanto a sus propiedades electrónicas, excepto por la presencia de un pequeño gap que convierte al siliceno en un semiconductor. Las imágenes STM proporcionan información valiosa sobre su estructura y propiedades. La validación de la Wannierización de la estructura es relevante debido a la importancia de las funciones de Wannier en el cálculo de fenómenos como transiciones topológicas de fases mediadas por un campo eléctrico externo perpendicular a la capa, a estudiarse en trabajos futuros.

PJ-24 Sistemas bidimensionales mixtos crecidos sobre Ag(111)

Javier D. Fuhr (1), J. Esteban Gayone(2), Hugo Ascolani(2)

(1) Centro Atómico Bariloche, CNEA y CONICET, Av. Bustillo 9500, (8400) S.C. de Bariloche (RN), Argentina.

(2) Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Nodo Bariloche, Av. Bustillo 9500, (8400) S.C. de Bariloche (RN), Argentina.

En este trabajo, estudiamos el crecimiento de una capa simple mixta de $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, con diversas estequiometrías, sobre la superficie de Ag(111). Estudiamos exhaustivamente la estructura atómica mediante experimentos de difracción de electrones de baja energía (LEED), microscopía de efecto túnel (STM) y espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS), así como cálculos basados en la teoría del funcional de densidad (DFT). Primero determinamos que el sistema Sb/Ag(111) para coberturas por debajo de 2/3 de monocapa se comporta de manera similar al sistema Bi/Ag(111), con una transición de de-aleación a una fase rectangular ($3 \times \sqrt{3}$) cuando la cobertura de Sb supera 1/3 de monocapa. Encontramos dos estrategias de preparación alternativas para obtener una capa mixta de $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$: deposición secuencial y deposición simultánea de Bi y Sb. En el primer caso, uno de los elementos se deposita sobre una aleación superficial completamente cubierta del otro elemento. La fase obtenida corresponde a una sola capa mixta de BiSb, libre de átomos de Ag, formando una estructura rectangular ($3 \times \sqrt{3}$). La estrategia de deposición simultánea produce la misma estructura pero ofrece la ventaja significativa de permitir una variación controlada de la estequiometría. La fase mixta obtenida de Bi-Sb tiene un arreglo atómico lateral muy similar al de la fase no aleada observada para Sb sobre

Ag(111), con átomos de Sb y Bi distribuidos desordenadamente, y presenta una corrugación vertical significativa, lo cual puede contribuir a un efecto Rashba considerable.

PJ-25 Diseño de plataformas nanoestructuradas modificadas con óxido de grafeno reducido para el desarrollo de sensores electroquímicos

J. M. Chierici [1,2], D. M. Arciniegas Jaimes [1,2], C. Demarchi [1], N. Bajales Luna [3,4], O. E. Linarez Pérez [1,2]

[1] Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba (UNC), Córdoba, Argentina; [2] Instituto de Investigaciones de Físico-Química de Córdoba (INFIQC), UNC, CONICET, Córdoba, Argentina; [3] Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, UNC, Córdoba, Argentina; [4] Instituto de Física "Enrique Gaviola" (IFEG), UNC, CONICET, Córdoba, Argentina

En los últimos años, numerosos estudios han puesto en evidencia la creciente preocupación por la presencia de cationes de metales pesados en agua de los distintos compartimentos ambientales, como Cr^{3+} , Cd^{2+} , Pb^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , entre otros. Frente a esta problemática, los métodos electroquímicos han ganado gran popularidad como una herramienta simple y económica en aplicaciones de detección o remoción de dichos contaminantes.

En este contexto, la incorporación de nanomateriales al diseño de nuevos electrodos ha mejorado notablemente su sensibilidad, estabilidad y especificidad [1]. Además, los nanomateriales bidimensionales, como el óxido de grafeno reducido (rGO), han sido objeto de estudio en aplicaciones de detección de contaminantes debido a que este posee una gran área superficial y además mantiene cierta cantidad de grupos funcionales oxigenados que pueden actuar como quelantes de especies catiónicas [2].

En este trabajo se ha explorado la respuesta de un electrodo conformado por una superficie nanoestructurada de Ti (Nano-Ti) modificada con rGO obtenido a partir de la reducción térmica de óxido de grafeno (GO). Durante el diseño de los electrodos Nano-Ti/rGO se ha realizado la caracterización morfológica (AFM y SEM), estructural (DRX) y química (XPS y EDS) y evaluado su actuación como sensor electroquímico ante cationes de interés, como Pb^{2+} (DPV).

Bibliografía:

[1] S. Sawan, et al. Trends in Analytical Chemistry 131 (2020) 116014.

[2] M. K. L. Silva & I. Cesarino. International Journal of Environmental Analytical Chemistry 102 (2020) 3109.

PJ-26 Estudio de las propiedades conductoras de películas de nanotubos de TiO_2 modificadas con nanopartículas metálicas

D. M. Arciniegas Jaimes [1,2], J. M. Chierici [1,2], C. Demarchi [1], N. Bajales Luna [3,4], O. E. Linarez Pérez [1,2]

- [1] Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba (UNC), Córdoba, Argentina; [2] Instituto de Investigaciones de Físico-Química de Córdoba (INFIQC), UNC, CONICET, Córdoba, Argentina; [3] Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, UNC, Córdoba, Argentina; [4] Instituto de Física "Enrique Gaviola" (IFEG), UNC, CONICET, Córdoba, Argentina.

La actividad de muchos procesos industriales son una fuente importante de contaminantes inorgánicos de aguas subterráneas y otros recursos hídricos, como el catión plomo y compuestos de arsénico que son extremadamente perjudiciales para el medio ambiente. Por esto, tanto su detección y cuantificación como el desarrollo de estrategias para el tratamiento de las aguas contaminadas representan un desafío actual y futuro para la comunidad científica.

En este contexto, las nanoestructuras de TiO_2 han llamado la atención como plataformas para la detección de contaminantes inorgánicos en agua debido a su inocuidad ambiental, buena conductividad electrónica/iónica, alta capacidad de adsorción y su relativo bajo costo [1, 2]. Las matrices o moldes compuestas por nanotubos (NTs) con tamaños de poros nanométricos permiten la posterior inclusión o preparación de arreglos ordenados de nanopartículas metálicas (NPs) dentro de su volumen para así mejorar su sensibilidad y estabilidad para la detección de trazas de contaminantes por métodos electroquímicos.

En el presente trabajo se muestran los resultados obtenidos de la síntesis y caracterización de plataformas de NTs de TiO_2 con NPs de Ni (Ni-NPs) y Au (Au-NPs) para su potencial aplicación en la detección de contaminantes inorgánicos en agua. Se mostrarán los resultados obtenidos de la caracterización morfológica (AFM y SEM), estructural (DRX), química (XPS y EDS) y electroquímica (EIE, CV).

Bibliografía:

- [1] J. M. George, et al. *Mikrochim Acta*. 185 (2018) 358.
[2] P. Liang, et al. *Analytica Chimica Acta*. 440 (2001) 207-13.

PJ-27 Estudio de recubrimientos de cromo electrodepositados sobre Zry4 para vainas combustibles

Quiroga A., M. Bernarda* ; Silva, C. Daniel; Melo, Alejandro J.; Leiva, Sergio F.; Fechner, Diana C., Oliver, Edgardo, A., Ilarri, Sebastián D.

División Nuevos Materiales y Dispositivos (NuMaDi) Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) Centro Atómico Bariloche, Río Negro, Argentina. *Correo electrónico: bquiroga@cab.cnea.gov.ar

Las aleaciones de Zirconio son utilizadas ampliamente en las centrales nucleares debido a su baja sección eficaz de captura de neutrones térmicos, buenas propiedades mecánicas y alta resistencia a la corrosión al agua del reactor a una temperatura de funcionamiento normal de aproximadamente 350°C . Sin embargo, un elevado aumento de temperatura, provoca que el revestimiento de óxido de zirconio ya no constituya una barrera fiable a la corrosión y a los fallos asociados a esta [1]. La rápida velocidad de oxidación del zirconio en estas condiciones lleva al crecimiento del espesor de la capa de óxido, a la degradación mecánica del revestimiento y a la liberación de hidrógeno con la consecuente generación de una mezcla explosiva de hidrógeno y oxígeno [2].

El objetivo de este trabajo es analizar el comportamiento frente a la corrosión de recubrimientos de cromo sobre aleaciones de Zry-4 en diferentes medios acuosos. Para ello, se caracterizó la superficie de Zry - 4 y se procedió a depositar sobre un blanco limpio un recubrimiento, que en una primera

instancia fue de níquel, actuando este metal como un intermediario para la posterior deposición de cromo. Estas dos fases de recubrimiento fueron realizadas en diferentes condiciones. De manera de obtener un material que resulte atenuante para las condiciones que experimentan las vainas combustibles en situación de accidente.

Las películas de cromo obtenidas fueron estudiadas por sus propiedades químicas y electroquímicas respecto al comportamiento frente a la oxidación, morfológicas por medio de la microscopía electrónica de barrido, analizando la estructura y las fases presentes en los films y determinación de sus espesores, y estudios de la resistencia frente a la irradiación como resultado de pruebas del daño superficial a partir de un haz de H⁺ con diferentes energías de haz incidente.

REFERENCIAS

1. A.S. Kuprin, V.A. Belous, V.N. Voyevodin*, V.V. Bryk, R.L. Vasilenko, V.D. Ovcharenko, E.N. Reshetnyak, G.N. Tolmachova, P.N. V'yugov, *J. of Nucl. Mat.*; 465 (2015) 400 – 406.
2. Minjiang Huang, Yipeng Li, Guang Ran, Zhongbo Yang, Penghui Wang; *J. of Nucl. Mat.*; 538 (2020) 152240.

PJ-28 Reactividad y estabilidad de catalizadores de átomo individual: Metal-N4 en grafeno

P. Abufager [1], R. Reocreux [2], N. Lorente [3] and M-L, Bocquet [2]

[1] Instituto de Física de Rosario, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. Universidad Nacional de Rosario, 27 de Febrero 210 Bis (2000) Rosario, Argentina [2] Laboratoire de Physique de l'École Normale Supérieure, ENS, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université Paris Cité, F-75005, Paris, France

Los catalizadores de átomo único (SACs) representan una frontera prometedora en la catálisis, con un potencial significativo para impactar las transiciones energéticas y ambientales. Estos catalizadores están compuestos por átomos de metales de transición (TM) incrustados en una matriz sólida, proporcionando un sistema heterogéneo caracterizado por una dispersión atómica y un entorno local bien definido [1]. Sin embargo, a pesar de sus intensas investigaciones, la comprensión fundamental de los SACs en entornos electroquímicos sigue siendo limitada. En particular, aunque los estudios computacionales han explorado la actividad y selectividad de estos catalizadores, su estabilidad a largo plazo—especialmente en condiciones electroquímicas—ha recibido mucha menos atención, a pesar de ser crítica para aplicaciones prácticas [2].

En este trabajo, realizamos cálculos en el marco de la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) para investigar la estabilidad de los SACs frente a la disolución en entornos electroquímicos. Nos enfocamos en SACs formados mediante la deposición de metales no nobles, como Fe y Cu, en grafeno dopados con N. Inicialmente, identificamos y establecemos un esquema de DFT adecuado para garantizar la fiabilidad y precisión del estudio. Además, evaluamos la selectividad de estos SACs para reacciones electroquímicas críticas, específicamente la reacción de evolución de hidrógeno (HER) y la reducción de dióxido de carbono (CO₂RR). Al examinar tanto la estabilidad como la selectividad, este estudio tiene como objetivo proporcionar una comprensión integral del potencial catalítico de estos SACs, contribuyendo a su desarrollo para aplicaciones prácticas.

Referencias:

- [1] Single atom catalysts push the boundaries of heterogeneous catalysis. *Nature Communications* 12, 5884 (2021)
- [2] Predicting the Stability of Single-Atom Catalysts in Electrochemical Reactions, G. Di Liberto, L. Giordano, and G. Pacchioni, *ACS Catal.* 2024, 14, 45-55

PJ-29 Superficies modificadas electroquímicamente con hidratos de carbono para la separación aceite-agua: propiedades y estudios de biofouling

N. García Saggion[1], A. Canneva[1], M.D. Sosa[2], M. Negri[3]*, N. D´Accorso[4], I. K. Levy[3]

[1] Ytec, Argentina, [2] Max Planck Institute for Polymer Research, Alemania, [3] INQUIMAE, Argentina, [4] CIHIDECAR, Argentina

La separación de mezclas de agua y sustancias orgánicas, como aceite y petróleo, ha despertado un creciente interés. En este trabajo, se prepararon membranas de separación agua-aceite, mediante la funcionalización de mallas metálicas (Cu/Zn) con hidratos de carbono, ácido múxico o glucónico, por vía electroquímica. Al aplicar un voltaje a la celda, los iones Cu^{2+} producidos interactuarían electrostáticamente con los grupos carboxílicos de los carbohidratos en solución, modificando la superficie de la malla utilizada como ánodo.

Se determinaron los parámetros óptimos del proceso y las membranas se caracterizaron mediante microscopía electrónica SEM, TGA y espectroscopía XPS. Sus propiedades superhidrofílicas se estudiaron mediante las determinaciones de ángulos de contacto, flujo de agua y separación de mezclas solvente/agua. Se realizaron estudios de biofouling, utilizando *Pseudomonas protegens*. Este es un punto crucial ya que las membranas desarrolladas contienen sustancias que podrían promover la formación de biopelículas bacterianas (biofilms).

El crecimiento de biofilms se estudió en placas de 24 pocillos utilizando *Pseudomonas protegens*, inóculo de OD 0,1 (600 nm), en medio de cultivo LB. El tiempo de incubación fue 24 h, a temperatura ambiente. La cuantificación del crecimiento se realizó mediante una adaptación desarrollada en nuestro laboratorio de la técnica de cristal violeta.

Las membranas mostraron propiedades superhidrofílicas en aire y superoleofóbicas bajo agua (ángulo de contacto de gotas de cloroformo $>155^\circ$). El flujo de agua en las membranas disminuyó apenas 15 %, respecto del flujo en ausencia de malla.

La cuantificación de biofilms mostró un crecimiento similar en mallas prístinas y membranas, tanto en el sustrato como en su entorno. Esto indica que la modificación de las mallas no promueve el crecimiento de biopelículas. Además, después de la incubación, no se observó daño a simple vista y las membranas mantuvieron su mojabilidad.

PJ-30 Reacción de reducción de oxígeno en redes de FePC y CoPC soportadas en oro: uniendo la teoría con experimentos

J. M. Lombardi [1], P. Abufager [1], E. Pensa [2], M. C. Rodríguez [3], F. López [3], R. Gutzler [2], H. F. Busnengo [1], K. Kern [2], D. Grumelli [3]

[1] Instituto de Física Rosario (IFIR-CONICET) y Universidad Nacional de Rosario, Rosario, 2000, Argentina; [2] Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, 70569, Alemania; [3] Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata - CONICET, 1900, La Plata, Argentina

Las metaloflaltocianinas (MPCs) son unidades estructurales ampliamente utilizadas en electrocatálisis debido a su capacidad para autoensamblarse en superficies metálicas, formando redes bidimensionales ordenadas de sitios reactivos. Esta característica las convierte en modelos excelentes para evaluar el rendimiento individual de los átomos de metales de transición en reacciones electrocatalíticas, particularmente en la Reacción de Reducción de Oxígeno (ORR). La eficiencia y selectividad de la ORR están fuertemente influenciadas por varios factores, como la identidad del centro metálico, las propiedades de la superficie metálica y la estructura de la red 2D. Por ejemplo, mientras que la FePC generalmente cataliza un proceso ORR de 4 electrones, en el caso de CoPC se han reportado rutas de ORR de 2 y 4 electrones, dependiendo del soporte superficial [1,2]. Así, aunque Co y Fe son candidatos prometedores para catalizar la ORR [3], es fundamental realizar un estudio detallado de los mecanismos responsables de la ORR.

En este estudio, presentamos una investigación teórica y experimental del rendimiento de la ORR utilizando redes 2D de FePC y CoPC en Au(111), preparadas bajo condiciones de ultra alto vacío. Elucidamos el mecanismo de la ORR mediante experimentos con electrodos de disco rotatorio, mientras que los cálculos de funcional de densidad acoplados con el método del Electrodo de Hidrógeno Computacional [4] nos permiten identificar los factores microscópicos que gobiernan la reactividad de los diferentes sistemas.

Referencias

- [1] J. Zagal et al, *Angew.Chem. Int. Ed.* 55, 14510 (2016)
- [2] C. Sun et al, *J. Electrochem. Soc.* 165 F24 (2018)
- [3] M. Xiao et al, *J. Am. Chem. Soc.* 141 17763 (2019)
- [4] J. K. Nørskov et al, *J. Phys. Chem. B* 108, 17886 (2004)

PJ-31 Estudio de modificaciones superficiales en ánodos de litio metálico mediante nitruro de boro exfoliado

M. Zampieri [1], G. L. Luque [2], F. VacaChávez [1]

[1] IFEG, Instituto de Física Enrique Gaviola, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Córdoba, Argentina, [2] INFIQC, Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Córdoba, Argentina

En este trabajo se modifica la superficie de ánodos de litio metálico con objetivo de prevenir y disminuir la formación de dendritas. El litio metálico es un material altamente prometedor para el almacenamiento de energía en baterías recargables y el desarrollo de vectores energéticos. No obstante, el principal desafío en la implementación radica en la formación de dendritas sobre el electrodo. Estas dendritas son estructuras ramificadas de litio que se generan durante los ciclos de carga y descarga, tienen como efecto reducir la capacidad y vida útil de la batería, además presentan un riesgo de fallo y cortocircuito. La modificación superficial que ha sido utilizada consiste en *drop-casting* de una dispersión de nitruro de boro hexagonal (hBN) exfoliado y tetrahydrofurano (THF). Este material es atractivo debido a que mediante su síntesis se logra una estructura mayormente bidimensional, lo cual modifica los sitios de nucleación, es decir los sitios de deposición de iones de litio (Li⁺) en el electrodo de litio metálico. Como técnica de caracterización se utilizaron medidas electroquímicas, resonancia magnética nuclear (RMN), Espectroscopia de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS) e imágenes de barrido electrónico (SEM).

PJ-32 “Estudio de superficies niqueladas por las técnicas electroless y electrolítica”

L. J. Palestri(1), P. C. Mogensen(1), L. G. Quintana(1), S. D. Ilarri(1,2), M. B. Quiroga Argañaraz(2)

1) ljpaestrini@cnea.gov.ar (1) Planta de recubrimientos especiales de interés nuclear, Complejo Pilcaniyeu, GCN, CNEA. (2) Nuevos Materiales y Dispositivos, GCN, CNEA.

Debido a sus propiedades dúctiles, conductoras de electricidad y ferromagnéticas, así como su resistencia a la corrosión y abrasión ocasionada por diversas sustancias químicas, el níquel es uno de los metales más utilizados para el recubrimiento de piezas de acero, latón, cobre y otros materiales de este tipo.

El niquelado generado por electrolisis consiste en un baño donde se sumergen las piezas a recubrir en una solución líquida de sulfatos, cloruros y otras sustancias que favorecen la humectación, ductilidad, purificación y brillo del acabado final. El recubrimiento se logra haciendo pasar una corriente eléctrica, donde el positivo son los trozos de níquel que se emplearán y el negativo es la pieza metálica que se está tratando, formando un circuito cerrado con la transmisión de la energía. Esta atraviesa la solución líquida en que están sumergidos permitiendo que los iones de níquel se disuelvan en el líquido y recubren el metal, donde la apariencia del material resultante depende de algunas condiciones específicas de la solución.

El recubrimiento electroless consiste en una reducción en fase acuosa y caliente en presencia de un agente reductor. Este reacciona con los iones metálicos recubriendo el metal, donde se cataliza al comienzo por el metal de la pieza y luego por el níquel que se ha depositado. Aún cuando no hay electrodos externos presentes, hay una corriente eléctrica generada por transferencia de carga. Esta técnica, se utiliza para depositar una capa de aleación níquel-fósforo o níquel-boro en una pieza de plástico o de metal. Este recubrimiento se caracteriza especialmente por dar espesores de capa uniforme, incluso en piezas que tienen una superficie irregular o en superficies interiores, originando superficies de una dureza muy alta y una excelente protección contra la corrosión. Además, estos revestimientos son soldables y, a pesar de que el níquel es ferromagnético, sus depósitos pueden no serlo.

En este trabajo, se muestran los resultados obtenidos del niquelado de diferentes tipos de superficies

aplicando ambas técnicas de recubrimiento. Verificando los espesores de las mismas por microscopía SEM, por coulombimetría y a partir de diferencias de masa. Además, se determinó la calidad de los depósitos estudiando la composición de los mismos por EDS y por fluorescencia de rayos X.

PJ-33 Estudio superficial de separadores recubiertos con cerámicos y su aplicación en baterías litio-azufre

G. Tommasone [1], F. P. Cometto [2], G. L. Luque [1]

[1] 1 Instituto de investigaciones en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, X5000, Argentina, [2] Instituto de investigaciones en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, X5000, Argentina

Los separadores son membranas permeables que actúan como barrera física para prevenir el contacto entre los electrodos en la batería. Sirven como reserva de electrolito y permiten la conductividad iónica. Los separadores influyen en el rendimiento y seguridad de la celda, los convencionales están hechos de poliolefinas. Estos separadores son estables electroquímica y mecánicamente, sin embargo, tienen baja estabilidad, baja humectabilidad y muestran pobre retención de electrolito.

En este trabajo, los separadores convencionales son modificados para mejorar sus propiedades químicas y físicas, como la humectabilidad del electrolito, conductividad iónica, y estabilidad térmica. Además, la modificación de los separadores puede ayudar a mejorar requerimientos específicos, como la retención de los polisulfuros en baterías de litio-azufre.

El objetivo principal de este trabajo es la modificación de separadores basados en poliolefinas con distintos cerámicos, y estudiar sus propiedades fisicoquímicas, electroquímicas y superficiales con enfoque en la Espectroscopía de Fotoelectrones Inducidos por Rayos X (XPS). Para ello se utilizó Celgard 2325 modificado y sin modificar. Las partículas cerámicas utilizadas fueron Lithium-Ion Conducting Glass Ceramics (LICGC).

Se armaron celdas litio-azufre para medir el rendimiento electroquímico de los separadores modificados con ciclados galvanostáticos. Luego del ciclado los ánodos, cátodos y separadores fueron estudiados a través de XPS para evaluar el efecto de los cerámicos en la batería y la interacción de estos con los polisulfuros.

Los resultados mostraron una mejora en la conductividad iónica y humectabilidad de los separadores modificados. El ángulo de contacto disminuyó en los separadores recubiertos. También se observó una mejora en la capacidad de la batería y performance en general. A través de los estudios en XPS se observó una retención de polisulfuros en los separadores modificados.

PJ-34 Diseño y optimización de ensamblados de polímeros redox entrecruzados y lacasas recombinantes para la construcción de biocátodos de celdas de combustible enzimáticas

A. Köhler [1], S.A. Wirth [2], M. L. Cortez [3], O. Azzaroni, [3], F. Battaglini [1,4] y L. L. Coria Oriundo [1,4]

[1] Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN – UBA, Argentina; [2] Instituto de Biodiversidad y Biología Experimental y Aplicada, UBA – CONICET, Argentina; [3] Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, UNLP – CONICET, Argentina; [4] Instituto de Química, Física de Materiales, Medio Ambiente y Energía, UBA – CONICET, Argentina

Una celda de combustible enzimática (CCE) es un dispositivo de conversión de energía caracterizado por el uso de enzimas redox como biocatalizadores. Dado que el proceso limitante en las CCE de O₂-glucosa es la reacción de reducción de oxígeno, se utilizan lacasas en la construcción del biocátodo. Para optimizar la inmovilización de la enzima se usa una especie redox que actúa como sustrato artificial en una transferencia electrónica mediada. Los polímeros redox son una alternativa muy utilizada como mediadores redox, que además pueden formar sistemas autoensamblados con las enzimas. Asimismo, previamente se ha reportado que el uso de iones multivalentes como matriz de poliaminas redox y no-redox, forma partículas coloidales debido a que estos iones actúan como entrecruzantes mediante uniones de puente hidrógeno.

En este trabajo se usó el polímero redox OsbPEI (complejo de osmio unido a polietilenimina ramificada) como mediador redox de la lacasa recombinante SilA para la construcción de biocátodos. Se estudió el efecto de especies con grupo sulfonato (HEPES e isetionato) y fosfato (tripolifosfato (TPP) y dodecilo fosfato) como entrecruzantes del polímero redox, variando la concentración y la fuerza iónica (FI). Mediante medidas de DLS se verificó que el uso de estas especies como matriz del polímero conduce a la formación de partículas coloidales de entre 100 y 500 nm de diámetro. Estas partículas redox se ensamblaron capa-por-capta con la lacasa y se evaluó la respuesta catalítica. Con los sistemas HEPES a baja FI y TPP a alta FI, se obtuvieron los mejores resultados alcanzando densidades de corriente catalítica de 160 y 250 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$, respectivamente, a temperatura ambiente y en condiciones estáticas. La incorporación de estos entrecruzantes además de mejorar la adsorción del polímero, optimiza el proceso de transferencia electrónica. Los valores de densidad de corriente obtenidos indican que estos sistemas tienen un gran potencial para su uso como biocátodos en CCE.

PJ-35 Electrodo de Sr(Ti,Fe)O₃ dopado con Ni con exsolución de nanopartículas bimetalicas para celdas de óxido sólido: estudios basados en luz síncrotron en entornos de H₂ y CH₄ como combustibles

M.Arce, M.Santaya, N.Gamba, H.Troiani[1], C.Jiménez, R.García-Diez, M.vdMerwe, R.Wibowo[2], L.Toscani[3], E.Carbonio[2,4], V.Pérez,I.Villar[6], R.Gottesman[7], A.Knop-Gericke[4,8], M.Bär[2,5,9], L.Mogni[1]

[1] INN-CNEA-CONICET, CAB, Bariloche, Argentina; [2] HZB, Berlin, Alemania; [3] ITECA-UNSAM-CONICET, Buenos Aires, Argentina; [4] FHI-MPG, Berlin, Alemania; [5] FAU Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Alemania; [6] ALBA Light Source, Barcelona, España; [7] Inst. of Chem., Center for Nanoscience and Nanotech., HUJI, Jerusalem, Israel; [8] MPI-CEC, Mülheim an der Ruhr, Alemania; [9] HI ERN, Berlin, Alemania

Las celdas de óxido sólido (SOC) se destacan como una de las tecnologías más prometedoras para la

transición energética, debido a varios factores, entre ellos: (i) su alta eficiencia para la generación eléctrica (celda de combustible, SOFC) y de combustibles (electrolizador, SOEC), así como, (ii) el uso de electrodos económicos y su flexibilidad para distintos combustibles. Una de las estrategias emergentes de funcionalización en electrodos corresponde a la exsolución de nanopartículas (NPs) metálicas para potenciar la actividad electrocatalítica. Esta consiste en la segregación controlada de cationes del óxido huésped (e.g. perovskita) formando NPs ancladas a la superficie. Este enfoque ofrece ventajas frente a otras estrategias de funcionalización: mejor distribución y mayor estabilidad/durabilidad nanoestructural bajo las severas condiciones operativas de atmósfera y temperatura de las SOC.

Para estudiar este fenómeno es crucial el empleo de técnicas in-situ y operando que permitan comprender el efecto de los parámetros operativos en la formación y estabilidad de las NPs, su actividad electrocatalítica y la eventual reversibilidad del fenómeno. En este sentido, las técnicas de caracterización de in-situ/operando basadas en luz sincrotrón (e.g. espectroscopías de absorción y fotoelectrónica de rayos X a presión cercana a la ambiental, AP-XPS/XAS) son muy eficaces para responder a estos interrogantes.

En este trabajo se estudiaron electrodos basados en la perovskita $\text{SrTiO}_{3-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-d}$ dopada con Ni (STFN), usando las técnicas avanzadas de luz sincrotrón antes mencionadas. Se conformaron celdas modelo usando circonia estabilizada con yttria (YSZ) como electrolito y se depositó STFN por láser pulsado (PLD). Se estudió por AP-XPS/XAS el proceso de exsolución de NPs, su reversibilidad y el impacto en sus propiedades y desempeño electroquímico en entornos de operación cercanos a la realidad: alta temperatura, diferentes atmósferas (O_2 , H_2 y CH_4) y polarización del electrodo.

PJ-36 Películas delgadas de Au obtenidas por electrodepositos como primer eslabón en el diseño de heteroestructuras (Au/ZnO).

Josefina Ventre*,(1) Lucas Melia*,(2) Eduardo Prieto,(1) Victoria Gallegos,(3) Francisco J. Ibañez,(1) Laura Damonte.(2)

(1) Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata – CONICET, B1900 La Plata, Provincia de Buenos Aires. (2) Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas, Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Universidad Nacional de La Plata – CONICET, Sucursal 4 Casilla de Correo 16 (1900), La Plata, Argentina. (3) Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, “Dr. Jorge J. Ronco” (C

El estudio de nanoestructuras ZnO/Au es interesante debido a su potencial para mejorar la fotocatalisis, gracias a la sinergia entre las propiedades semiconductoras del ZnO y la capacidad del oro para amplificar la absorción de luz hacia el rango visible debido a la generación de plasmones superficiales. En el caso de películas de Au, la presencia de plasmones superficiales¹⁻⁴ sigue siendo ampliamente utilizada en aplicaciones tales como biosensores, dispositivos de conversión fotovoltaica, etc.^{5,6} En el presente trabajo se prepararon películas delgadas de Au sobre sustratos transparentes de vidrio/ITO (recubrimiento de óxido de indio y estaño) mediante electrodeposición (ED). La ED se realizó potenciostáticamente, empleando una solución acuosa con bajas concentraciones de ácido sulfúrico (H_2SO_4) y tetracloruro áurico (HAuCl_4). Se exploran parámetros como el tiempo, potencial, agitación y tratamiento térmico con el objetivo de analizar su influencia en las propiedades morfológicas y ópticas de las películas obtenidas. Se aplicaron potenciales entre -500 y 0 mV (vs. Ag/AgCl), resultando en la formación de películas delgadas con distintas morfologías y grados de homogeneidad. Asimismo, se evaluó el efecto del tiempo durante la aplicación del potencial, variando entre 1 y 20 minutos,

observando mediante espectroscopía UV-Vis un desplazamiento hacia el azul en la banda de absorción plasmónica. Tal desplazamiento es consistente con las variaciones en la cobertura de Au depositado sobre el electrodo, así como en el tamaño y la forma de las nanopartículas. Las propiedades estructurales y morfológicas fueron analizadas utilizando difracción de rayos X (DRX) y microscopía de fuerza atómica (AFM). Se concluye que tanto el tiempo como el potencial aplicado influyen significativamente en la morfología final de las películas delgadas. Cabe destacar que, mediante un método sencillo, de bajo costo y soluciones amigables con el ambiente es posible obtener nanoestructuras de Au con un crecimiento controlado. Actualmente se están probando heteroestructuras combinadas de ZnO que junto con las películas de Au puedan utilizarse en dispositivos de conversión fotovoltaica (celdas solares) y remediación ambiental (fotodegradación).

Referencias

- (1) Link et al. *Int. Rev. Phys. Chem.* 2000, 19 (3), 409–453.
- (2) Bohren et al. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*; Wiley: New York, 1983.
- (3) Kelly et al. *J. Phys. Chem. B* 2003, 107 (3), 668–677.
- (4) Goyal et al. Longowal, India, 2015; p 030067.
- (5) Pillai et al. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 2010, 94 (9), 1481–1486.
- (6) Mayer et al. *Chem. Rev.* 2011, 111 (6), 3828–3857.

PJ-37 Influencia del material precursor y la activación electroquímica en la deposición de oro sobre carbón activado

A. Gonzalez [1], S. Fuentes [1], N. Luna [1], H. Maffei [1], F. Filippin [1], N. Diaz [1] y H. Fasoli [1],[2]

[1] Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca, Argentina; [2] Facultad de Ingeniería del Ejército - Universidad de la Defensa Nacional, Argentina

En el área de la electroquímica, los materiales basados en carbono son claves para lograr un aprovechamiento óptimo de la energía. Investigaciones actuales están enfocadas al uso de precursores más económicos y ambientalmente más sustentables, como es el caso de los residuos agroindustriales con alto contenido de materia orgánica. En esta comunicación describimos nuestros avances en la obtención y caracterización de electrodos de nanoestructuras de oro sobre carbón activado (CA). Siendo este último obtenido a través de pirólisis del alperujo de la aceituna y posterior activación electroquímica. Se realizaron pruebas de electrodeposición de oro a nivel de laboratorio, con un posterior análisis vía Microscopía Estereoscópica, Microscopía SEM-DRX y Análisis de Imagen. Los cuales mostraron que el oro no se deposita en forma uniforme al interior del CA. En forma general, se observó un aumento de la cantidad de depósito hacia los bordes de los surcos (orificios) generando aglomerados alargados sobre el CA. Estos hallazgos son consistentes con estudios previos que destacan la influencia del tipo de activación y el origen del material precursor en las propiedades electroquímicas de los carbones activados. La caracterización electroquímica ha demostrado ser una herramienta valiosa para entender y optimizar las propiedades de los materiales carbonosos en aplicaciones de energía renovable.

PJ-38 Electrodo basado en perovskitas de Ce-Sr(Ti,Fe)O₃ con exsolución superficial de Ni-Co-Fe para celdas de óxido sólido simétricas

C.E. Callenbach Tellechea [1,2], M.D. Arce [2], H.E. Troiani [2,3], L.V. Moggi [1,2], M. Santaya [2]

[1] Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, S. C. de Bariloche, Rio Negro, 8400, Argentina; [2] Departamento de Caracterización de Materiales, INN-CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche, S. C. de Bariloche, Rio Negro, 8400, Argentina; [3] Universidad Nacional de Rio Negro, Argentina.

Las celdas de óxido sólido (SOC) son dispositivos capaces de convertir la energía de una reacción química directamente en energía eléctrica (modo SOFC) o de producir combustibles de alta pureza utilizando energía eléctrica (modo SOEC). En el marco de la incipiente Transición Energética, esta tecnología ha despertado gran interés debido a su alta eficiencia y a la versatilidad en el uso de combustibles. Dentro de las numerosas propuestas de electrodos para SOC, se destaca la familia de óxidos con estructura perovskita ABO₃ de composición base Sr(Ti_{0.3}Fe_{0.7})O_{3-δ} (STF). Este material tiene excelente rendimiento tanto como cátodo en aire y como ánodo en atmósfera de hidrógeno, lo que lo convierte en una excelente alternativa para celdas simétricas. Sin embargo, si bien tolera combustibles como metano o etanol sin sufrir depósitos de carbono, no es apropiado para la oxidación electroquímica de estos hidrocarburos.

En este trabajo diseñamos un electrodo basado en STF especialmente dopado, introduciendo simultáneamente Ce para reemplazar parcialmente al Sr en el sitio A, y a su vez Ni y Co para reemplazar parcialmente al Fe en el sitio B. Se desarrollaron dos materiales de composiciones nominales (Ce_{0.1}Sr_{0.9})(Ti_{0.3}Fe_{0.6}Ni_{0.05}Co_{0.05})O_{3-δ} (Ce1-STFNC05) y (Ce_{0.2}Sr_{0.8})(Ti_{0.3}Fe_{0.5}Ni_{0.1}Co_{0.1})O_{3-δ} (Ce2-STFNC1). Con este dopaje simultáneo se busca que los óxidos, al ser sometidos a tratamientos térmicos a alta temperatura en atmósfera reductora, queden decorados superficialmente con nanopartículas metálicas de Ni-Co-Fe (proceso conocido como 'exsolución') y cerámicas de CeO₂ con distribución homogénea. Se analizará la evolución del material a lo largo del proceso y se estudiará este mecanismo de decoración superficial simultánea como un método innovador para potenciar el rendimiento electroquímico aplicando técnicas de caracterización estructural y microestructural.

PJ-39 Modelo de electrodos utilizados en celdas de combustible: estudio teórico comparativo de las propiedades de nanocompuestos de titania sobre grafeno u óxido de grafeno como soportes

S. Schinca Vanini 1, C. I. N. Morgade 2 y G. F. Cabeza 1

1 Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur - Instituto de Física del Sur Bahía Blanca, Argentina; 2 Universidad Tecnológica Nacional, FRBB, Bahía Blanca, Argentina Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur - Instituto de Física del Sur Bahía Blanca, Argentina

Entre las diversas tecnologías propuestas para electrodos, se ha prestado especial atención al uso de soportes de carbono por proporcionar una estructura conductora y porosa que facilita la dispersión del catalizador. Uno comúnmente empleado en celdas de combustible (FC) con membrana de intercambio

protónico es el platino (Pt). Sin embargo, la presencia de nanopartículas de titania (TiO₂) ofrece una alternativa más económica y abundante [1]. Tanto el grafeno (G) como el óxido de grafeno (GO) [2] junto con el TiO₂ poseen propiedades interesantes que podrían mejorar el rendimiento de las FC promoviendo la transferencia electrónica en reacciones electroquímicas y fotocatalíticas.

En este trabajo, investigamos la interacción de NP de (TiO₂)_N (N = 1 a 5) depositadas sobre GO y G. Las simulaciones se realizaron mediante cálculos ab initio utilizando el código VASP [3] e incorporando la corrección de Van der Waals. Los resultados muestran que variar el valor de N induce cambios significativos en las propiedades electrónicas y ópticas de los sistemas. Las energías de adsorción indican que la adsorción es más favorable en GO que en G, con un incremento del 70 al 90 % y que disminuye con el aumento de N, destacando que para N = 2 se observa la menor energía de adsorción sobre GO (-2.7 eV) y la máxima absorción con un corrimiento hacia la región visible.

La presencia de O en la superficie del GO facilita la formación de enlaces Ti-O-C, lo que promueve la transferencia de electrones, como se observa en el análisis de cargas de Bader y confirma la presencia de estados de alta movilidad dentro del BG. El análisis comparativo de las propiedades ópticas revela que las NP depositadas sobre GO presentan un band gap ligeramente inferior al de aquellas depositadas sobre G. El estudio se completa con la presencia de NP de Pt depositadas y la adsorción de moléculas de oxígeno.

1. S. Anandan, et al, App. Mat. Int 5 (2013) 207
2. A. Yadav, et al, Carbon 143 (2019) 51.
3. G. Kresse, et al, Comput. Mater. Sci. 6 (1996) 15.

PJ-40 Síntesis de películas de MoS₂ y evaluación de sus propiedades electrocatalíticas: efecto del espesor del precursor de Mo y del etching químico con H₂O₂

Carlos Monzón [1], Karen Navarro [2], Juan De Paoli [1] y Martín Patrino [1]

[1] Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias químicas, Instituto de Investigaciones en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), Universidad Nacional de Córdoba, X5000 Córdoba, Argentina ; [2] Universidad de La Sabana, Chía-Cundinamarca, Colombia

El MoS₂ es un material 2D que se ha destacado como un catalizador prometedor para la reacción de desprendimiento de hidrógeno (HER), por su bajo costo, alta estabilidad y favorable relación área/masa de catalizador. Sin embargo, sus planos basales son químicamente inertes frente a la HER, y su baja conductividad limita su eficiencia catalítica. Estos desafíos han motivado numerosas investigaciones centradas mejorar la transferencia de carga y en incrementar los sitios activos, ya sea optimizando la síntesis o mediante la generación controlada de defectos post-síntesis. La sulfurización de películas predepositadas de Mo se presenta como un método que permite controlar el espesor del MoS₂, como así también la proporción de cristales verticales que exponen bordes catalíticamente activos frente a la HER. A su vez este método permite la síntesis directa sobre el electrodo de trabajo, lo que reduce las resistencias por contacto. En cuanto a la generación de defectos post-síntesis, se ha establecido que las vacancias de azufre son los principales sitios activos en la HER. En este trabajo, se sintetizaron películas de MoS₂ mediante sulfurización a 900°C de películas de Mo predepositadas mediante sputtering con espesores de 1, 5 y 10 nm sobre carbono vítreo. El espesor y las propiedades

ópticas de las películas se evaluaron mediante elipsometría espectroscópica, y la morfología superficial se caracterizó mediante SEM. La actividad electrocatalítica frente a la HER en medio ácido (0,5 M H_2SO_4) se evaluó antes y después de un tratamiento de etching con H_2O_2 . Los resultados mostraron que el espesor del precursor de Mo influye significativamente en la actividad catalítica, destacándose la película de 10 nm como la más eficiente. En todos los casos, el tratamiento con H_2O_2 mejoró el rendimiento catalítico del MoS_2 . Este trabajo ofrece una estrategia efectiva para optimizar la actividad catalítica, combinando la optimización de la síntesis con tratamientos post-síntesis.

PJ-41 Síntesis, caracterización y actividad catalítica de heteropoliácidos dopados con niobio

María B. Colombo Migliorero [1], Agustín Ponzinibbio[1], Gustavo P. Romanelli [2], Valeria Palermo[2], Patricia G. Vázquez[2], José M. López Nieto[3]

[1]CEDECOR (UNLP-CIC), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina [2]CINDECA, (CONICET-CIC-UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina. [3] ITQ (CSIC-UPV), Instituto de Tecnología Química, Universitat Politècnica de València, Valencia, España

Debido a su elevada fuerza ácida, propiedades redox y baja toxicidad, los heteropoliácidos son muy utilizados como catalizadores en reacciones de oxidación completa o parcial. En este trabajo se presentan dos metodologías de síntesis de heteropoliácidos dopados con niobio, utilizando como fuente de este elemento dos reactivos diferentes (pentóxido de niobio y oxalato de niobio). Los dos materiales sintetizados fueron caracterizados mediante espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier, espectroscopía Raman, difracción de rayos X, titulación potenciométrica y microscopía electrónica de barrido, que permitieron confirmar la estructura Keggin. Además, se han estudiado las propiedades catalíticas de estos materiales en la oxidación selectiva de difenil sulfuro a difenil sulfóxido, utilizando condiciones de reacción eco-amigables y comparando además los resultados obtenidos con ácido fosfomolibdico comercial, encontrándose evidencia de que la incorporación de Nb+5, como dopante, aumenta la actividad catalítica. Se observó que el empleo de precursores diferentes modifica la fuerza ácida y la morfología del HPA obtenido, lo que se refleja en su capacidad catalítica en la reacción de oxidación de difenil sulfuro, encontrándose que el material preparado a partir de los óxidos de niobio y molibdeno presenta mejor actividad catalítica: mayor conversión y selectividad en menores tiempos de reacción. El mejor resultado se obtuvo empleando el catalizador preparado a partir del óxido de Nb, con el que se alcanza una conversión del difenil sulfuro de 93 % y una selectividad hacia el difenil sulfóxido de 94 % a las 7 h de reacción a temperatura ambiente.

PJ-42 Caracterización de Películas Poliméricas Estabilizadas por Puentes de Hidrógeno: Estudio Espectroscópico y Efecto de la Fuerza Iónica

J. Martín [1], Y. Perez Sirkin [2] y L. Méndez De Leo [3]

[1] INQUIMAE FCEN UBA CONICET, Argentina; [2] INQUIMAE FCEN UBA CONICET, Argentina; [3] INQUIMAE FCEN UBA CONICET, Argentina

Las superficies modificadas con nanopartículas (NPs) metálicas tienen un gran interés tecnológico, especialmente en las áreas de catálisis y sensores electroquímicos [1]. Una estrategia útil para facilitar la inmovilización y organización de NPs en una matriz, para controlar el tamaño y la distribución, es usar películas poliméricas que atrapan el ion precursor y limitan su difusión libre. Estos iones metálicos son luego reducidos química o electroquímicamente. Así, las películas pueden actuar como nano-reactores que permiten la formación de electrocatalizadores "in situ". Para un diseño inteligente del proceso de modificación de superficies con nanopartículas embebidas en películas poliméricas, es fundamental estudiar las películas, en especial los equilibrios químicos que se establecen en ellas, responsables de la estabilidad de las películas y la incorporación de los iones metálicos mediante la formación de complejos de coordinación.

En este trabajo se prepararon películas poliméricas estabilizadas por uniones puente de hidrógeno combinando dadores de protón, como el ácido poliacrílico (PAA) y el ácido polimetacrílico (PMAA); y aceptores de protón, como el óxido de polietileno (PEO) e hidroxietil celulosa (HEC). El estudio de estos sistemas mediante espectroscopía infrarroja (FTIR - PMIRRAS) permitió caracterizar la interacción por uniones puente de hidrógeno entre las cadenas poliméricas-ya que el grupo funcional ácido carboxílico es muy sensible a cambios en su entorno, como el equilibrio de ionización de los grupos carboxílicos del PAA/PMMA-valiéndose del cambio en el espectro de absorción del carboxílico cuando pierde un protón y se transforma en carboxilato. Además, se estudió el efecto de la fuerza iónica y la influencia de la intensidad de la unión puente de hidrógeno entre los polímeros, en el equilibrio de ionización del PAA/PMMA.

[1] Kim, J.; Song, J. T.; Ryoo, H.; Kim, J.-G.; Chung, S.-Y.; Oh, J; Journal of Materials Chemistry A 2018, 6, 5119-5128.

PJ-43 Preparación y caracterización de Ba_{0.85}Ca_{0.15}Zr_{0.1}Ti_{0.9}O₃ (BCZT) como material piezocatalítico para degradación de compuestos orgánicos.

N. Mamana [1] [2], V. Roldán [1] y N. Pellegrini [1] [2]

[1] Instituto de Física Rosario, FCEIA- CONICET, Argentina; [2] Fac. Cs Exactas, Ingeniería y Agrimensura-UNR, Argentina

El agotamiento de los combustibles fósiles y el impacto medioambiental negativo derivado de su uso impulsan continuamente el desarrollo de nuevas estrategias para realizar procesos demandados por la vida cotidiana usando fuentes de energía renovables y limpias. Así, los materiales piezoeléctricos se presentan como herramientas útiles para coleccionar energía mecánica y convertirla en energía eléctrica y luego química, disponible ésta para la producción de especies reactivas de oxígeno (ROS). Estos reactivos son intermediarios de distintos procesos como la degradación de contaminantes, producción de H₂ y actividad microbicida entre otros. Dentro del grupo de cerámicos piezoeléctricos el BaTiO₃ es adecuado a estos fines por el bajo impacto ambiental de su manufactura y procesamiento aunque presenta el inconveniente de tener una baja actividad piezoeléctrica. Una estrategia posible para mejorar el coeficiente piezoeléctrico del material es agregar dopantes a su composición. En este trabajo se propone la obtención de Ba_{0.85}Ca_{0.15}Zr_{0.1}Ti_{0.9}O₃ (BCZT) mediante la técnica sol-gel y se

evalúa su actividad piezocatalítica. Los polvos de BCZT fueron obtenidos por secado de una solución cuya preparación se llevó a cabo utilizando como precursores, alcóxidos de circonio y titanio y sales de calcio y bario, en etanol. Se utilizó 3-hidroxi-2-butanona (acetoín) como agente quelante. Luego de la evaporación del solvente, los polvos fueron molidos y tratados térmicamente para la eliminación de sustancias orgánicas y cristalización de los mismos. Por difracción de rayos X se determinó que un tratamiento de 150 min a 1000C fue suficiente para lograr la cristalización de la muestra con estructura de perovskita. Por microscopía electrónica de barrido, se determinó la morfología y distribución de tamaños de partículas de los polvos obtenidos post-calcinación y luego de una molienda manual de 15 min. Se evaluó la actividad piezocatalítica del material en polvo usando el colorante naranja de metilo como modelo de contaminante orgánico. Como fuente de energía mecánica se utilizó un baño ultrasónico de 160 Watts y 35 kHz. Se observó que el material degradó el 42 % del colorante después de 120 minutos de reacción.

PJ-44 Diseño de electrocatalizadores de $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ modificados con Pt y Pd para la reacción de reducción de oxígeno

E. D. Schulte [1], J. M. Lombardi [2], D. Grumelli [3], H. F. Busnengo [4] y P. Abufager [4]

[1] Instituto de Física de Rosario (IFIR - CONICET), Rosario, Argentina; [2] Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, Berlín, Alemania; [3] Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA - CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, La Plata, Argentina; [4] Instituto de Física de Rosario (IFIR - CONICET), Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentina

La magnetita (Fe_3O_4), uno de los materiales magnéticos más antiguos y versátiles, ha sido extensamente estudiada por sus aplicaciones en espintrónica, biomedicina y catálisis. En particular, la superficie $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ con reconstrucción SCV (subsurface cation vacancy) ha mostrado estabilidad en un amplio rango de potenciales químicos, lo que la convierte en una candidata prometedora para reacciones electroquímicas como la reducción de oxígeno (ORR). Esta superficie es capaz de inmovilizar átomos metálicos individuales, lo que modifica sus propiedades catalíticas.

En este trabajo, se investigan las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de la superficie $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ reconstruida, antes y después de la deposición de átomos individuales (SACs) de Pt y Pd, utilizando cálculos de Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Los resultados muestran que ambos átomos se adsorben preferentemente en sitios de oxígeno coordinados octaédricamente con iones de Fe, transfiriendo carga a la superficie y modificando la interacción con los intermediarios de la ORR. Entre los intermediarios estudiados, se observó que la adsorción de O_2 sobre estos sistemas induce la formación de un estado de superóxido (O_2^-), con una configuración de adsorción tipo Fe-O-O-M (M = Pt, Pd), lo cual podría favorecer la reacción de reducción de oxígeno.

Este estudio aporta información relevante para el diseño de nuevos electrocatalizadores basados en superficies de magnetita modificadas con metales de transición, optimizando su desempeño en reacciones de interés tecnológico.



Información Útil

Sponsors



