

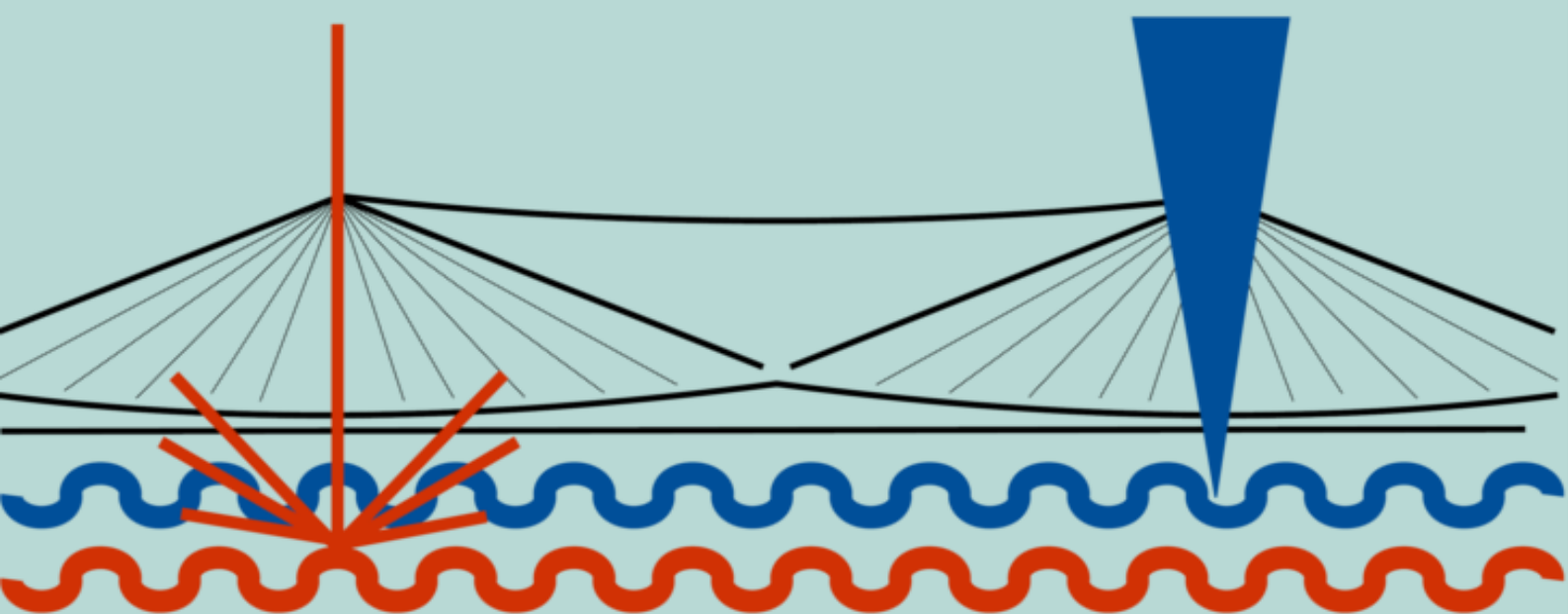


CONICET



IFIS LITORAL

VII Encuentro de Física y Química de Superficies



26, 27 y 28 de octubre de 2016
Santa Fe, Argentina

Comité Científico

Dr. Celso Aldao, INTEMA, Mar del Plata
Dra. Silvina Bengió, CAB, Bariloche
Dra. Bárbara Blum, INIFTA, La Plata
Dra. Gabriela Cabeza, UNS, Bahía Blanca
Dr. Daniel Linares, UNSL, San Luis
Dra. Alejandra Martínez, IFIR, Rosario
Dr. Luis Otero, UNRC, Río Cuarto
Dra. Patricia Paredes, INFIQC, Córdoba
Dr. Federico Williams, UBA, Buenos Aires
Dr. Mario Passeggi (h), IFIS, Santa Fe

Comité Organizador

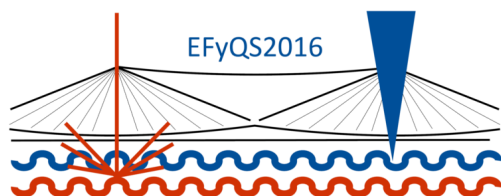
Dr. Mario Passeggi (h), IFIS, Santa Fe
Dr. Ricardo Vidal, IFIS, Santa Fe
Dr. Gustavo Morales, UNRC, Río Cuarto
Dr. Julio Ferrón, IFIS, Santa Fe
Dra. Evelina García, IFIS, Santa Fe
Dr. Fernando Bonetto, IFIS, Santa Fe
Dra. Lucila Cristina, IFIS, Santa Fe
Dr. Gustavo Ruano, IFIS, Santa Fe
Dra. Silvia Montoro, IFIS, Santa Fe
Dr. Claudio Bonin, IFIS, Santa Fe
Ing. Adriana Candia, IFIS, Santa Fe
Ing. Vanessa Quintero-Riascos, IFIS, Santa Fe
Dr. Sebastián Collins, INTEC, Santa Fe
Dr. José Fernández, PRELINE, Santa Fe

Edición del Libro de Resúmenes: Dr. Mario C.G. Passeggi (h)

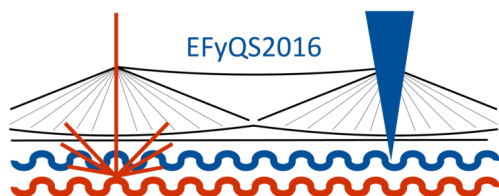
Auspiciantes



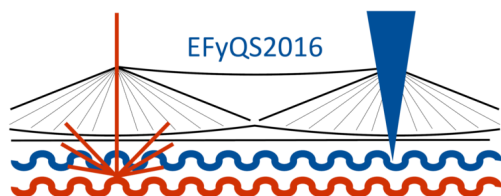
Horario	Miércoles 26	Jueves 27	Viernes 28
8:00	Acreditación (**)		
	Colocación de Pósters (**)		
9:00	Coffee Break (**)	Conferencia Plenaria - CP3 (*) Presenta S. Collins J. Anibal Boscoboinik	Conferencia Plenaria - CP5 (*) Presenta C.I.N. Morgade Ricardo Faccio
9:40	Acto de Apertura (*)		
10:00	Conferencia Plenaria - CP1 (*) Presenta G. Ruano Magalí Lingenfelder	Coffee Break (**)	Coffee Break (**)
10:40		Chairman: J.L. Fernández - Oral - CO8 (*)	Conferencia Tutorial - CT2 (*) Presenta R.A. Vidal Erlón H. Martins-Ferreira
11:00	Chairman: E.A. García - Oral - CO12 (*)	Oral - CO9	
11:20	Oral - CO2	Oral - CO15	
11:40	Oral - CO3	Conferencia Tutorial - CT1 (*) Presenta J. Ferrón Julio Camarero de Diego	Chairman: L. Cristina - Oral - CO13 (*)
12:00	Conferencia Semiplenaria - CS1 (*)		Oral - CO14
12:20	Presenta B. Blum: Doris Grumelli		Oral - CO10
12:40	Almuerzo (Libre)		Conferencia Plenaria - CP6 (*) Presenta M.C.G. Passeggi (h) Julio Camarero de Diego
13:00			
13:40			Acto de Clausura (**)
14:00			Almuerzo en el Bar Estación Belgrano (**)
15:00	Chairman: A. Martínez - Oral - CO4 (*)	Chairman: F. Bonetto - Oral - CO11 (*)	
15:20	Oral - CO5	Oral Emp. - COE2 (JEOL, Brasil)	
15:40	Oral Emp. - COE1 (Scienta-Omicron, Alemania)	Oral Emp. - COE3 (CITES, Argentina)	
16:00	Coffee Break (**)	Coffee Break (**)	
	Pósters (**)	Pósters (**)	
18:00	Chairman: S. Bengió - Oral - CO6 (*)	Conferencia Semiplenaria - CS2 (*) Presenta E.D. Farias: Verónica Brunetti	
18:20	Oral - CO7		
18:40	Conferencia Plenaria - CP2 (*)	Conferencia Plenaria - CP4 (*)	
19:00	Presenta D.H. Linares	Presenta M.C.G. Passeggi (h)	
19:20	Anibal J. Ramírez-Cuesta	Jorge Lobo-Checa	
19:40			
20:15		Visita a la Cervecería Santa Fe (***)	
...		Cena "Patio de la Cervecería" (***)	
	(*) Auditorio del CONICET-Santa Fe,	(**) "Altos de la Belgrano" Ctro. de Convencio-	(***) Cervecería Santa Fe
	Edificio Houssay II, Güemes 3450	nes en la Estación Belgrano, Bvd. Gálvez 1150	Restaurant "Patio de la Cervecería"



Programa		
Miércoles 26 de Octubre		
8:00 - 9:40 hs.	Acreditación Colocación de Pósters	<i>"Coffee Break"</i>
9:40 - 10:00 hs.	Acto de Apertura	
10:00 - 11:00 hs.	Presenta Dr. G. Ruano	Conferencia Plenaria - CP1 Dra. Magalí Lingenfelder <i>"Nanoarquitectura: nanoestructuras funcionales que se autoconstruyen"</i>
11:00 - 12:00 hs.	Chairman: Dra. E.A. García	Comunicaciones Orales
11:00 - 11:20 hs.	Comunicación Oral - CO12 (M.A.C. Huergo)	
11:20 - 11:40 hs.	Comunicación Oral - CO2 (C. Buono)	
11:40 - 12:00 hs.	Comunicación Oral - CO3 (V. Yelpe)	
12:00 - 12:40 hs.	Presenta Dra. B. Blum	Conferencia Semi-plenaria - CS1 Dra. Doris Grumelli <i>"Propiedades electro-catalíticas de sistemas bidimensionales preparados en ultra alto vacío"</i>
12:40 - 15:00 hs.	Almuerzo	
15:00 - 16:00 hs.	Chairman: Dra. A. Martínez	Comunicaciones Orales
15:00 - 15:20 hs.	Comunicación Oral - CO4 (S. Bengió)	
15:20 - 15:40 hs.	Comunicación Oral - CO5 (F.C. Calaza)	
15:40 - 16:00 hs.	Comunicación Oral Empresa - COE1 (B. Fadgen, QUANTUM)	
16:00 - 18:00 hs.	<i>"Coffee Break"</i>	Exposición de Pósters
18:00 - 18:40 hs.	Chairman: Dra. S. Bengió	Comunicaciones Orales
18:00 - 18:20 hs.	Comunicación Oral - CO6 (P. Machaín)	
18:20 - 18:40 hs.	Comunicación Oral - CO7 (A.C. Rossi)	
18:40 - 19:40 hs.	Presenta Dr. D.H. Linares	Conferencia Plenaria - CP2 Dr. Aníbal J. Ramírez-Cuesta (Timmy) <i>"Neutrons and numbers: the VISION challenge. The world's first high throughput Inelastic Neutron Scattering Spectrometer"</i>



Jueves 27 de Octubre		
9:00 - 10:00 hs.	Presenta Dr. S. Collins	Conferencia Plenaria - CP3 Dr. J. Aníbal Boscoboinik <i>"Ciencia de superficies para el estudio de catalizadores modelo: el caso de zeolitas bidimensionales"</i>
10:00 - 10:40 hs.	<i>"Coffee Break"</i>	
10:40 - 11:40 hs.	Chairman: Dr. J.L. Fernández	Comunicaciones Orales
10:40 - 11:00 hs.	Comunicación Oral - CO8 (L.F. Peiretti)	
11:00 - 11:20 hs.	Comunicación Oral - CO9 (S. M. Mendoza)	
11:20 - 11:40 hs.	Comunicación Oral - CO15 (N.E. Muzzio)	
11:40 - 12:40 hs.	Presenta Dr. J. Ferrón	Conferencia Tutorial - CT1 Dr. Julio Camarero de Diego <i>"Tutorial on advanced magneto-optic based instrumentation: from vectorial- resolved MOKE to element-resolved magnetic holography imaging"</i>
12:40 - 15:00 hs.	Almuerzo	
15:00 - 16:00 hs.	Chairman: Dr. F. Bonetto	Comunicaciones Orales
15:00 - 15:20 hs.	Comunicación Oral - CO11 (C.I.N. Morgade)	
15:20 - 15:40 hs.	Comunicación Oral Empresa - COE2 (R.G. Torres-Leal, JEOL)	
15:40 - 16:00 hs.	Comunicación Oral Empresa - COE3 (G.R. Marchesini, CITES)	
16:00 - 18:00 hs.	<i>"Coffee Break"</i>	Exposición de Pósters
18:00 - 18:40 hs.	Presenta Dra. E.D. Farias	Conferencia Semi-plenaria - CS2 Dra. Verónica Brunetti <i>"Preparación, caracterización y aplicaciones de nuevos materiales dendronizados"</i>
18:40 - 19:40 hs.	Presenta Dr. M.C.G. Passeggi (h)	Conferencia Plenaria - CP4 Dr. Jorge Lobo-Checa <i>"Curved crystal surfaces: a genuine playground for Surface Science"</i>
20:15 - 21:30 hs.	Visita a la Cervecería Santa Fe	
21:30 -	Cena en el "Patio de la Cervecería"	



Viernes 28 de Octubre

9:00 - 10:00 hs. Presenta Dra. C.I.N. Morgade Conferencia Plenaria - CP5
Dr. Ricardo Faccio
"Propiedades electrónicas en sistemas metal-porfirina"

10:00 - 10:40 hs. *"Coffee Break"*

10:40 - 11:40 hs. Presenta Dr. R.A. Vidal Conferencia Tutorial - CT2
Dr. Erlón H. Martins-Ferreira
"Raman spectroscopy as metrological tool in the study of carbon nanostructures: a tutorial"

11:40 - 13:00 hs. Chairman: Dra. L. Cristina Comunicaciones Orales

11:40 - 12:00 hs. Comunicación Oral - CO13 (M.A. Zensich)

12:00 - 12:20 hs. Comunicación Oral - CO14 (T.J. Gutiérrez)

12:20 - 12:40 hs. Comunicación Oral - CO10 (A.M. Tarditi)

12:40 - 13:40 hs. Presenta Dr. M.C.G. Passegi (h) Conferencia Plenaria - CP6
Dr. Julio Camarero de Diego
"Role of magnetic anisotropy in magnetic nanostructures: from spintronic to biomedical applications"

13:40 - 14:00 hs. Acto de Clausura

14:15 - 16:00 hs. Almuerzo en el Bar Estación Belgrano

Conferencias Plenarias

CP1.- Nanoarquitectura: nanoestructuras funcionales que se autoconstruyen**Magalí Lingenfelder***Max Planck-EPFL Laboratory for Molecular Nanoscience, EPFL, Lausanne, Switzerland**E-mail: magali.lingenfelder@epfl.ch*

La ciencia de superficies nos permite acercarnos cada día al objetivo principal de la nanociencia: ganar control preciso sobre la materia a nivel atómico. Los avances en las microscopías de sonda de barrido (STM, AFM) y su combinación con el modelado teórico y espectroscopías avanzadas utilizando luz sincrotrón, nos han permitido acceder al mundo de los átomos y las moléculas individuales y estudiar los efectos de sus estructuras como determinantes de su funcionalidad a escala nanométrica. Combinando los ladrillos moleculares y/o atómicos apropiados sobre superficies descubrimos las redes de coordinación metal-orgánicas [1-3] y logramos obtener arquitecturas funcionales pudiendo controlar, por ejemplo: las interacciones de tipo “host-guest” [4-6], la quiralidad [7-11] y la anisotropía magnética en arreglos bidimensionales [12].

Además de estudiar los principios que controlan el autoensamblado tanto en sistemas biológicos (proteínas, péptidos, enzimas) como en sistemas artificiales (redes moleculares y de coordinación metal-orgánicas), actualmente nuestro laboratorio se enfoca en utilizar racionalmente la ecuación estructura-función para diseñar materiales híbridos biomiméticos sobre superficies [13].

En esta charla, discutiremos los orígenes de la nanoarquitectura y su futuro en el campo de la fotosíntesis artificial; en particular, en la activación de dióxido de carbono (Fig. 1). Asimismo, abordaremos los alcances de la nanoarquitectura en el diseño de materiales inteligentes tanto en sistemas ideales (ultra alto vacío) como bajo condiciones ambientales (interfaz líquido/sólido).

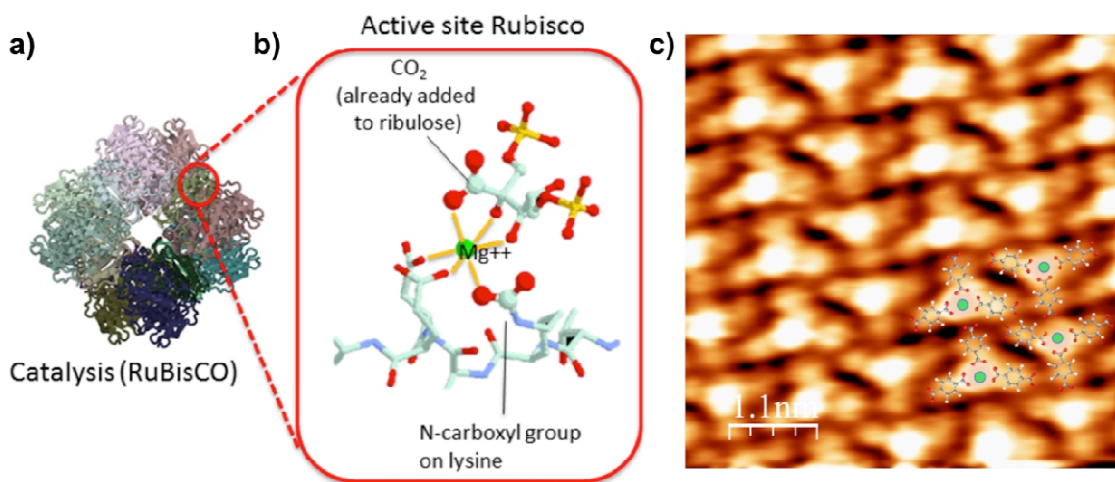


Figure 1: (a) Representación de la enzima *RuBisCO* y (b) su sitio activo. (c) Imagen STM de una red biomimética de Mg y ácido tereftálico sobre Cu(100).

- [1] M.A. Lingenfelder, H. Spillmann, A. Dmitriev, S. Stepanow, N. Lin, J.V. Barth, K. Kern, *Chemistry - A European Journal* 10 (2004) 1913.
- [2] A.P. Seitsonen, M. Lingenfelder, H. Spillmann, A. Dmitriev, S. Stepanow, N. Lin, K. Kern, J.V. Barth, *Journal of the American Chemical Society* 128 (2006) 5634.
- [3] Y. Wang, M. Lingenfelder, S. Fabris, G. Fratesi, R. Ferrando, T. Classen, K. Kern, G. Costantini, *The Journal of Physical Chemistry C* 117 (2013) 3440.
- [4] S. Stepanow, M. Lingenfelder, A. Dmitriev, H. Spillmann, E. Delvigne, N. Lin, X. Deng, Ch. Cai, J.V. Barth, K. Kern, *Nature Materials* 3 (2004) 229.
- [5] F.P. Cometto, K. Kern, M. Lingenfelder, *ACS Nano* 9 (2015) 5544.

- [6] S.L. Lee, Y. Fang, G. Velpula, F.P. Cometto, M. Lingenfelder, K. Müllen, K.S. Mali, S. De Feyter, *ACS Nano* 9 (2015) 11608.
- [7] M. Lingenfelder, G. Tomba, G. Costantini, L. Colombi Ciacchi, A. De Vita, K. Kern. *Angewandte Chemie International Edition* 46 (2007) 4405.
- [8] G. Tomba, M. Lingenfelder, G. Costantini, K. Kern, F. Klappenberger, J.V. Barth, L. Colombi-Ciacchi, A. De Vita, *The Journal of Physical Chemistry A* 111 (2008) 12740.
- [9] Y. Wang, M. Lingenfelder, T. Classen, G. Costantini, K. Kern, *Journal of the American Chemical Society* 129 (2008) 15742.
- [10] H. Ascolani, M.W. van der Meijden, L. J. Cristina, J.E. Gayone, R.M. Kellogg, J.D. Fuhr, M. Lingenfelder, *Chemical Communications* 50 (2014) 13907.
- [11] M.W. van der Meijden, E. Gelens, N. Murillo Quirós, J.D. Fuhr, J.E. Gayone, H. Ascolani, K. Wurst, M. Lingenfelder, R.M. Kellogg, *Chemistry - A European Journal* 22 (2016) 1484.
- [12] P. Gambardella, S. Stepanow, A. Dmitriev, J. Honolka, F.M.F. de Groot, M. Lingenfelder, S. Sen Gupta, D.D. Sarma, P. Bencok, S. Stanescu, S. Clair, S. Pons, N. Lin, A.P. Seitsonen, H. Brune, J.V. Barth, K. Kern, *Nature Materials* 8 (2009) 189.
- [13] R. Gutzler, S. Stepanow, D. Grumelli, M. Lingenfelder, K. Kern, *Accounts of Chemical Research* 48 (2015) 2132.

CP2.- Neutrons and numbers: the VISION challenge. The world's first high throughput Inelastic Neutron Scattering Spectrometer**Aníbal J. (Timmy) Ramírez-Cuesta**

*Chemical Spectroscopy Group, Chemical and Engineering Materials Division, NScD,
Oak Ridge National Laboratory, TN 37831-6473 Oak Ridge, USA
E-mail: ramirezcueaj@ornl.gov*

Molecular spectroscopy is a very powerful tool to study the dynamical properties of solid, liquid and gases. Inelastic Neutron scattering is a very powerful tool to study hydrogen-containing materials. With the development of neutron spallation sources, and the use of epithermal neutrons, inelastic neutron scattering can measure the vibrational spectra of materials on the whole range of vibrational motions ($0-4400\text{ cm}^{-1}$) and effectively opening up the field of neutron spectroscopy [1]. INS is a technique that was mostly used to study hydrogen-containing materials due to the high cross section of hydrogen [2].

The recently commissioned VISION spectrometer at the SNS in Oak Ridge Tennessee has an increased overall flux at low energy transfers up to 4000 times over its predecessors and it has unprecedented sensitivity. I will examine the limits of what is now possible in INS thanks to VISION. From the determination of INS spectra of publishable quality in minutes (for samples in the gram quantity range) [3], measuring the signal of samples in the milligram range to the direct determination of the signal of 2 mmol of CO_2 adsorbed on functionalized catalysts [4].

Sample environment developments are a crucial part of an effective neutron scattering program, at VISION we have developed the world's largest single crystal diamond anvil cell and measured the INS spectra of 1 mm^3 of a HMB sample. Gas handling experiments are trivial to perform. A sample changer designed for VISION is being built, it is a whole new concept that will allow continuous operation for large number of samples (hundreds at a time) that will enhance the mail-in program for sample measurement. Recently, a simultaneous Raman and INS center-stick has been developed and tested in VISION measuring simultaneously the rotational spectra of hydrogen in the gas, liquid and in the solid state as function of the relative para-ortho hydrogen concentrations. We also have *in-situ* dielectric spectroscopy capabilities. There is a catalysis cell and gas handling equipment that is currently being built to perform *in-situ* chemical reactions.

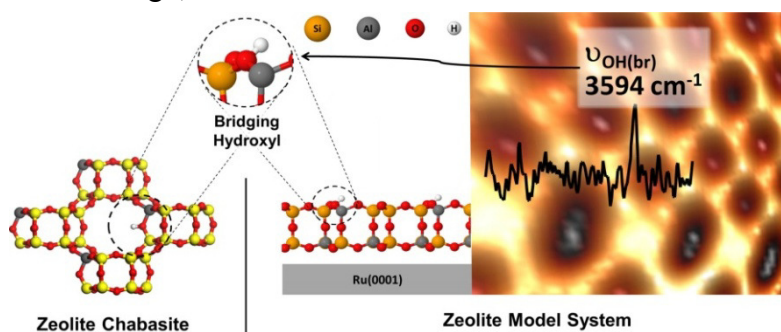
Finally, the major challenges that we are facing will be discussed, in particular methods to automate data analysis and interpretation through computer modeling [5]. We have recently commissioned VirtuES (VIRTUAl Experiments in Spectroscopy), March 2016, a computer cluster dedicated to analyze VISION data. We are developing the software to maximize the potential of the technique by generation of automated VDoS, generation of thermodynamic data, creation of databases *etc.*.

- [1] P.C.H. Mitchell, S.F. Parker, A.J. Ramírez-Cuesta, J. Tomkinson, *Vibrational Spectroscopy with Neutrons, with applications in Chemistry, Biology, Materials Science and Catalysis*. London: World Scientific; 2005.
- [2] A.J. Ramírez-Cuesta, M.O. Jones, W.I.F. David, *Materials Today* 12 (2009) 54.
- [3] N. Jalarvo, O. Gourdon, G. Ehlers, M. Tyagi, S.K. Kumar, K.D. Dobbs, M.K. Crawford, *The Journal of Physical Chemistry C* 118 (2014) 5579.
- [4] T.J. Bandoz, M. Seredych, E. Rodríguez-Castellón, Y. Cheng, L.L. Daemen, A.J. Ramírez-Cuesta, *Carbon* 96 (2016) 856.
- [5] M.E. Casco, Y.Q. Cheng, L.L. Daemen, D. Fairen-Jiménez, E.V. Ramos-Fernández, A.J. Ramírez-Cuesta, J. Silvestre-Albero, *Chemical Communications* 52 (2016) 3639.

**CP3.- Ciencia de superficies para el estudio de catalizadores
modelo: el caso de Zeolitas bidimensionales****J. Aníbal Boscoboinik**

Center for Functional Nanomaterials, Brookhaven National Laboratory,
Bldg. 735, NY 11973 Upton, USA
E-mail: jboscoboinik@bnl.gov

La ciencia de superficies ha permitido resolver numerosos problemas en catálisis heterogénea, lo que le valió a Gerhard Ertl el premio Nobel de química en el 2007 por sus contribuciones en este campo. Sin embargo, los catalizadores sólidos más usados en la industria, o sea las zeolitas, nunca han sido estudiados desde este punto de vista por una razón muy simple. Las zeolitas son materiales cristalinos compuestos por Si, O y Al que forman un arreglo tridimensional ordenado de poros, donde los sitios activos son ácidos de Brönsted (hidroxilos puente, ver figura) localizados en el interior de los poros. Este hecho hace que el sitio activo sea inaccesible a las técnicas analíticas típicamente usadas en ciencia de superficies. Para resolver este problema hemos sintetizado una estructura bidimensional que tiene hidroxilos puentes expuestos que se comportan de manera similar a aquellos presentes en zeolitas tridimensionales [1]. Esta estructura tiene un comportamiento químico similar al caso tridimensional, pero puede ser estudiada usando las técnicas analíticas de ciencia de superficies. Esto abre innumerables puertas para el estudio detallado de mecanismos de reacción en estos catalizadores [2]. Otra manera de estudiar zeolitas que estamos explorando es el uso de zeolitas reales exfoliadas y depositadas en sustratos metálicos. También hemos explorado esta opción para el caso de nanoláminas de MFI de 3 nm de espesor [3]. Para dar una idea de la importancia en la industria, las zeolitas se usan para el craqueo de petróleo crudo y se están empezando a usar más activamente como catalizador para la síntesis de combustibles líquidos de alta densidad energética, como la gasolina, a partir de metanol, entre muchos otros usos en catálisis. Al final de la charla se dará también una breve descripción de la instrumentación disponible para usuarios externos en el “Center for Functional Nanomaterials”, en BNL. Estos instrumentos de última generación están disponibles de forma gratuita para instituciones académicas (<http://www.bnl.gov/cfn/>).



Izquierda: ejemplo de una zeolita tridimensional con esqueleto CHA y estructura de la zeolita bidimensional presentada en este trabajo. En ambos casos el sitio catalíticamente activo es un hidroxilo puente, el cual se muestra enfatizado con un círculo. Derecha: imagen de STM de la superficie con resolución atómica y espectro vibracional del hidroxilo puente.

- [1] J.A. Boscoboinik, X. Yu, B. Yang, F.D. Fischer, R. Wlodarczyk, M. Sierka, S. Shaikhutdinov, J. Sauer, H.-J. Freund, *Angewandte Chemie International Edition* 51 (2012) 6005.
- [2] J.A. Boscoboinik, S.K. Shaikhutdinov. *Catalysis Letters* 2014, DOI: 10.1007/s10562-014-1369-3.
- [3] J.-Q. Zhong, J. Kestell, I. Waluyo, S.B. Wilkins, C. Mazzoli, A. Barbour, K. Kaznatcheev, M. Shete, M. Tsapatsis, J.A. Boscoboinik. *Journal of Physical Chemistry C* 2016, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b02851.

CP4.- Curved crystal surfaces: a genuine playground for surface science

Jorge Lobo-Checa

Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA),
CSIC-Universidad de Zaragoza, E-50009 Zaragoza, España
E-mail: jorge.loboc@csic.es

Crystal surfaces with a small deviation from a high symmetry plane have enormous potential for surface science research and applications. Such “vicinal” planes, characterized by arrays of atomic steps, exhibit distinct chemical and electronic properties, and are useful templates to achieve uniaxial symmetry and single azimuthal domains in epitaxial layers, or to drive self-organized nanostructure growth.

A way of systematically studying step-related phenomena is to use curved crystals [1]. The beauty of these special substrates is that they integrate all vicinal directions, which are accessible by scanning the source beam or tip along the curvature of the crystal. In this way, the sample provides a smooth variation of the step density that is directly related to a terrace width variation from sub-micron to the nanometer range.

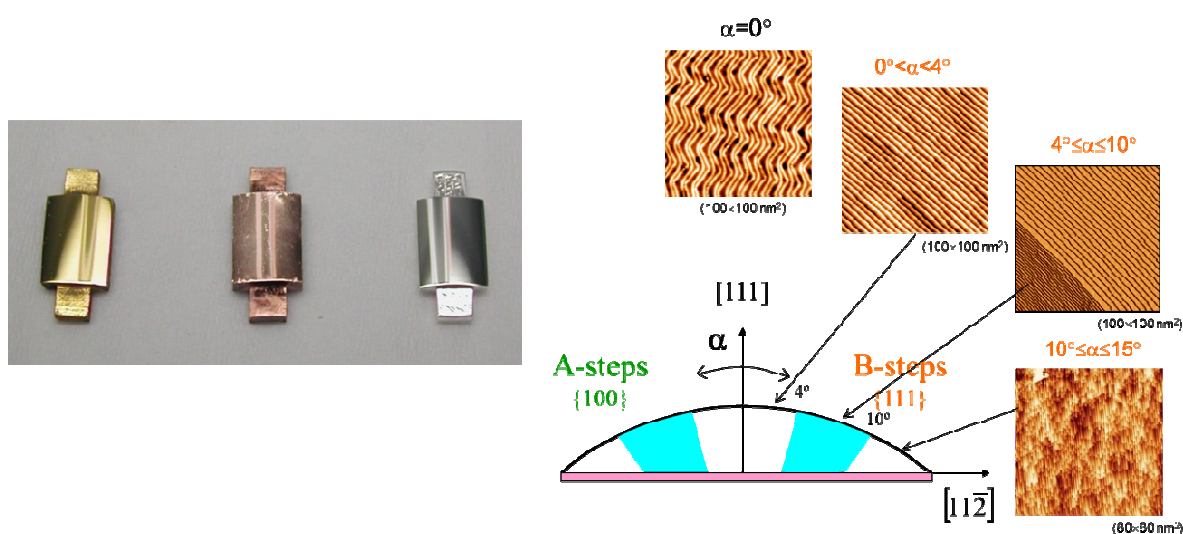
These samples have allowed us to revisit old and to explore new surface science problems [2-4]. I will discuss step-lattice interactions, scattering of surface states, core-level shifts, growth, and chemisorption. Our experiments demonstrate the immense power of the curved surface approach, which allows one to directly image fine physical-chemical properties of surface systems, such as to settle controversial issues and to unveil new phenomena.

[1] <http://bihurcrystal.com/>.

[2] J.E. Ortega, J. Lobo-Checa, G. Peschel, S. Schirone, Z.M. Abd El-Fattah, M. Matena, F. Schiller, P. Borghetti, P. Gambardella, A. Mugarza, *Physical Review B* 87 (2013) 115425.

[3] A.L. Walter, F. Schiller, M. Corso, L.R. Merte, F. Bertram, J. Lobo-Checa, M. Shipilin, J. Gustafson, E. Lundgren, A.X. Brión-Ríos, P. Cabrera-Sanfelix, D. Sánchez-Portal, J.E. Ortega, *Nature Communications* 6 (2015) 8903.

[4] L.A. Miccio, M. Setvin, M. Müller, M. Abadía, I. Piquero, J. Lobo-Checa, F. Schiller, C. Rogero, M. Schmid, Daniel Sánchez-Portal, U. Diebold, J.E. Ortega, *NanoLetters* 16 (2016) 2017.



Left: Photograph of curved crystals of the three noble metals close to the (111) plane.

Right: Structural evolution of the surface of Au(111) investigated by STM, where the herringbone reconstruction has a strong influence upon the resulting surface morphology.

CP5.- Propiedades electrónicas en sistemas metal-porfirina**Ricardo Faccio**

Centro NanoMat, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
E-mail: rfaccio@fq.edu.uy

La electrónica molecular y la espintrónica requieren un conocimiento profundo de los procesos que ocurren en la interface de moléculas y las superficies donde se depositan. En primera instancia presentaremos un estudio teórico/experimental para tetrafenil porfirinas de cobalto depositadas sobre $Cu_3N-Cu(110)$ [1]. Este sistema promueve el desacoplamiento de estados electrónicos de manera selectiva, permitiendo así su visualización y los respectivos estados vibrónicos en experimentos de STM a baja temperatura. Pero así como los niveles moleculares se aíslan, los estados con simetría z presentan una fuerte interacción con el sustrato, a diferencia de lo que ocurre cuando la misma molécula se deposita sobre $Cu(110)$. Cálculos de primeros principios confirman la geometría de adsorción observada y el desacoplamiento electrónico antes mencionado.

En segunda instancia mostraremos como sistemas análogos al anterior pueden ser considerados como diodos moleculares. Se han realizado estudios de tetrafenil porfirinas depositadas en $Cu_3Au(100)$, y dependiente del metal sustituyente de la molécula es posible obtener un efecto rectificador, de tipo diodo con respuesta “ n ” o “ p ”. La remoción parcial de hidrógenos, mediante STM permite modificar el estado de cargas de las moléculas de porfirina y así modificar el comportamiento eléctrico. Los cálculos por primeros principios permiten entender el mecanismo de rectificación en función del alineamiento de los niveles electrónicos y su hibridación, la cual depende de la simetría de los estados involucrados [2].

[1] V. Zoldan, Ch. Gao, R. Faccio, A.A. Pasa, *Journal Physical Chemistry C* 117 (2013) 15984.

[2] V. Zoldan, R. Faccio, A.A. Pasa, *Nature Scientific Reports* 5 (2015) 1.

**CP6.- Role of magnetic anisotropy in magnetic nanostructures:
from spintronic to biomedical applications**

**Julio Camarero,^{1,2} Paolo Perna,² Alberto Bollero,²
Francisco J. Terán,² Rodolfo Miranda^{1,2}**

1.- Departamento de Física de la Materia Condensada, Instituto Nicolás Cabrera, e IFIMAC,
Universidad Autónoma de Madrid (UAM), 28049 Madrid, España

2.- Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia, IMDEA-Nanociencia,
Campus Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, España

E-mail: julio.camarero@uam.es

The research on magnetic nanostructures has experienced fascinating progress in the last few decades and continues as an exciting research field, aiming to benefit society helping to considerably improve many technology and industry sectors: information technology, energy, and medicine, among many others. The understanding and control of magnetic nanostructures are required in order to achieve high performance magnetic-based systems. Magnetic symmetry, dimensionality, and interfacial effects promote much of the properties observed in complex magnetic nanostructures. The competition between different anisotropy contributions can result in different magnetic configurations, reversal processes, and/or transport phenomena, in which the temperature may, in addition, play a crucial role. Here, we will introduce open issues related to spintronics, permanent magnets, and cancer therapy, providing the keys to develop potential improved devices with tailored properties.

Despite the enormous market moving around the spintronic technologies, the microscopic understanding of magnetoresistive effects in low dimensional structures has not been fully addressed experimentally so far. We have recently shown that anisotropic magnetoresistance effects are generic notion and that only detailed angular-dependent studies combining magnetoresistive and vectorial-resolved magnetic hysteresis loops provide its origin [1,2]. For instance, the magnetoresistive response presents different fingerprints that depend sensitively on the details of the magnetic field value and orientation, for both single and multilayered systems, and on the current direction in the case of single films. Permanent magnets (*PM's*) have become essential to daily-life products, but the fear of a rare-earth supply limitation has recently motivated numerous efforts on rare-earth free *PM's*. We have developed nanocomposite ferrite-based *PM's* exploiting nanostructuration and artificial interfacing, with a larger energy product by comparison with currently used ferrites and, consequently, with practical applications [3]. One of the main challenges faced by nanomedicine is to deliver the cancer treatment at the right place, at the right dose and at the right moment. In this sense, functionalized superparamagnetic nanoparticles can be used as “*therasnostic*” tools, for selective cancer cell imaging, targeting, and removing by magnetic hyperthermia. The guidelines to optimize their heat dissipation power via tailoring dynamic magnetization reversal and heating mechanism will be given [4], opening the way for this minimal-invasive and efficient diagnosis and therapeutic approach.

[1] P. Perna, D. Maccariello, C. Rodrigo, J.L.F. Cuñado, M. Muñoz, J.L. Prieto, M.A. Niño, A. Bollero, J. Camarero, R. Miranda, *Applied Physics Letters* 104 (2014) 202407.

[2] P. Perna, F. Ajejas, D. Maccariello, J.L.F. Cuñado, R. Guerrero, M.A. Niño, M. Muñoz, J.L. Prieto, R. Miranda, J. Camarero, *AIP Advances* 6 (2016) 055819.

[3] A. Bollero *et al.*, FP7-NANOPYME project, Nanocrystalline permanent magnets based on hybrid metal-ferrites.

[4] A. Somoza *et al.*, H2020-NoCanTher project Nanotechnology for cancer therapy.

Conferencias Semi-plenarias

CS1.- Propiedades electro-catalíticas de sistemas bidimensionales preparados en ultra alto vacío

Doris Grumelli

*Laboratorio de Nanoscopías y Fisicoquímica de Superficies, INIFTA,
Diagonal 113 Esquina 64, 1900 La Plata, Argentina
E-mail: doriselda@gmail.com*

En la emergente área de nuevas formas de energía, el estudio y el entendimiento de cómo funciona un catalizador a nivel fundamental para desarrollar nuevos diseños que permite mejorar el diseño de superficies electro-catalíticas, ha cobrado enorme importancia en la última década.

La preparación de superficies en ultra alto vacío (UHV) ha sido una herramienta fundamental en el campo de ciencias de superficies para estudiar en detalle superficies, ya que es una técnica limpia y que permite control absoluto de las condiciones de preparación. Por otro lado, si se desea dar utilidad a estas superficies es necesario atravesar la brecha entre UHV y la presión ambiente, de una manera limpia y controlada. Esto se ha realizado por medio de sistemas de transferencia donde la muestra es llevada gradualmente a condiciones ambientales mediante la introducción de un gas noble como Ar o N_2 .

Tomando la experiencia de sistemas biológicos, catalizadores por excelencia, y sistemas inorgánicos convencionales, nos hemos dedicado a preparar sistemas bidimensionales en UHV que contienen arreglos atómicos de espaciados determinados. En un caso se trata de redes 2D metalo-orgánicas, donde la molécula orgánica sirve de “*espaciadora*” entre los centros metálicos individuales. El mismo efecto de mantener átomos metálicos individuales separados es el uso de superficies de óxido de hierro (Fe_3O_4) en las cuales la reconstrucción de la misma sirve como molde para alojar metales. Para explorar las propiedades electro-catalíticas de tales sistemas, la muestra se traslada a una celda electroquímica de un sistema de transferencia inerte, como el descripto anteriormente.

En la presentación se mostrarán la preparación y caracterización en UHV (STM, XPS, *etc.*) de superficies con arreglos 2D ordenados de obtenidos usando moléculas como adsorbentes o sustratos de óxido de hierro, su respuesta electrocatalítica y la estabilidad de los mismos luego de ciclados electro-catalíticos bajo condiciones ambientales.

**CS2.- Preparación, caracterización y aplicaciones
de nuevos materiales dendronizados****Verónica Brunetti**

*Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (UNC-CONICET), Departamento de Fisicoquímica,
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba,
Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina
E-mail: brunetti@fcq.unc.edu.ar*

Desde su aparición hace ya más de tres décadas, los dendrímeros han captado la atención debido a sus propiedades tan particulares [1]. Sus unidades monoméricas están diseñadas de tal forma que mientras el radio del polímero crece en forma lineal, el número de grupos terminales crece en forma geométrica. Esta particularidad le confiere a los dendrímeros un gradiente radial de propiedades. Estos polímeros presentan integridad y homogeneidad estructural, una cavidad interna bien definida disponible para encapsular otra molécula (propiedades endoreceptoras), una composición bastante controlada y múltiples y homogéneos grupos terminales activos para una dada reacción de interés (propiedades exoreceptoras). Los dendrones, unidades estructurales de un dendrímero, también pueden ser empleados para la modificación química de un sustrato manteniendo a su vez el efecto dendrítico deseado con menor esfuerzo sintético. Los polímeros hiperramificados, al ser sintetizados en un solo paso tienen una estructura menos controlada que los dendrímeros, sin embargo aún son capaces de presentar efecto dendrítico. Las superficies hiperfuncionalizadas y multiramificadas que se obtienen utilizando estas moléculas dendríticas se denominan superficies dendronizadas [2].

La inmovilización de polímeros dendríticos sobre superficies sólidas permite crear superficies estructuradas a nivel de nanoescala con una significativa versatilidad, dada por la elección de la macromolécula que se utiliza como bloque constructivo. La arquitectura estructural de las moléculas dendríticas las hace ideales para crear nanomateriales activos y nanosistemas con múltiples aplicaciones. Esta estrategia brinda la posibilidad de diseñar materiales a medida otorgándole nuevas propiedades como hidrofiliicidad, adhesión, biocompatibilidad, *etc.* Por este motivo, la producción de material dendrítico tiene importantes aplicaciones en campos muy diversos, entre ellos, la liberación controlada de fármacos [3], catálisis heterogénea, almacenamiento de información, sensores, *etc.*

En esta presentación se describirá el diseño racional de distintas moléculas dendríticas funcionales, su síntesis, su empleo para la modificación de diferentes superficies inorgánicas y el estudio de las propiedades de los materiales híbridos resultantes. En particular, se mostrarán superficies de oro o carbono modificadas con dendrones, polímeros hiperramificados o nanoestructuras híbridas formadas con metales o nanopartículas magnéticas. El objetivo será mostrar cómo se forman estos sistemas preprogramados, en donde la funcionalidad introducida en cada molécula le otorga, en algunos casos, la capacidad de autoensamblarse de manera controlada y predecible sobre el sustrato elegido [4]. Por otra parte, se buscará establecer el efecto que tiene la arquitectura dendrítica sobre las características de cada superficie con vistas a aplicaciones particulares, ya sea como superficies resistente a proteínas [5], superficies electrocatalíticas [6] o bien, superficies sensoras para la cuantificación de un analito [7].

[1] D.A. Tomalia, A.M. Naylor, W.A. Goddard, *Angewandte Chemie International Edition* 29 (1990) 138.

[2] J.I. Paez, M. Martinelli, V. Brunetti, M.C. Strumia, *Polymers* 4 (2012) 355.

[3] V. Brunetti, L.M. Bouchet, M.C. Strumia, *Nanoscale* 7 (2015) 3808.

- [4] E.D. Farias, V. Brunetti, J.I. Paez, M.C. Strumia, M.C.G. Passeggi Jr., J. Ferron, *Microscopy and Microanalysis* 20 (2014) 61. J.I. Paez, M.C. Strumia, M.C.G. Passeggi Jr., J. Ferron, A.M. Baruzzi, V. Brunetti, *Electrochimica Acta* 54 (2009) 4192. J.I. Paez, A.L. Cappelletti, A.M. Baruzzi, V. Brunetti, M.C. Strumia, *Macromolecular Symposia* 290 (2010) 37.
- [5] J.I. Paez, V. Brunetti, M.C. Strumia, T. Becherer, T. Solomun, J. Miguel, C.F. Hermanns, M. Calderon, R. Haag, *Journal of Materials Chemistry* 22 (2012) 19488.
- [6] J.I. Paez, P. Froimowicz, A.M. Baruzzi, M.C. Strumia, V. Brunetti, *Electrochemistry Communications* 10 (2008) 541.
- [7] E.D. Farias, J.I. Paez, M.C. Strumia, A.M. Baruzzi, M.C.G. Passeggi Jr., V. Brunetti, *Electrochimica Acta* 134 (2014) 76.

Conferencias Tutoriales

**CT1.- Tutorial on advanced magneto-optic based instrumentation:
from vectorial-resolved MOKE to element-resolved
magnetic holography imaging****Julio Camarero**

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Instituto Nicolás Cabrera, e IFIMAC,
Universidad Autónoma de Madrid UAM, 28049 Madrid, España
E-mail: julio.camarero@uam.es*

Magneto-optic based techniques are widely applied in Nanomagnetism research because of its high sensitivity (down to nanometer thickness), time resolution (down to picosecond regime), vanishing substrate effects (limited penetration depth), and immunity to external fields (photon-in/photon-out approach). Dimensionality, magnetic symmetry, and/or interfacial effects promote much of the new properties observed in complex multilayered magnetic nanostructures. Current and future technologies require the control of those and the microscopic understanding of their emerging phenomena in order to can tailor novel devices based on magnetic nanostructures.

In this tutorial I will introduce the basics of magneto-optic phenomena exploited in advanced instrumentation. First, I will introduce the capabilities of a high resolution vectorial Kerr magnetomer [1,2] with angular, vectorial, temperature, and time resolutions, which required a relatively simple experimental implementation. Second, ultimate synchrotron-based techniques will be introduced [3,4] including resonant magnetic scattering holography imaging, which provide in addition the element selectivity required in order to disentangle the magnetic behaviour of multicomponent nanostructures. I will illustrate their capabilities with studies performed in model spintronic magnetic nanostructures, including ferromagnetic thin films, exchange-biased bilayer systems, and trilayers systems (*i.e.*, spin-valves and magnetic tunnel junctions). In brief, the data show the strong influence of the magnetic symmetry, dimensionality, and artificial interfaces on the properties of magnetic nanostructures, and provide the keys to control them. These fundamental understandings could be applicable to tailor the behaviour of magnetic nanostructures and, thus, to be the first step towards developing of devices with custom-chosen properties.

- [1] E. Jiménez, N. Mikuszeit, J.L.F. Cuñado, P. Perna, J. Pedrosa, D. Maccariello, C. Rodrigo, M.A. Niño, A. Bollero, J. Camarero, R. Miranda, *Review of Scientific Instruments* 85 (2014) 053904.
- [2] J.L.F. Cuñado, J. Pedrosa, F. Ajejas, A. Bollero, P. Perna, F.J. Teran, R. Miranda, J. Camarero, *Review of Scientific Instruments* 86 (2015) 046109.
- [3] J. Miguel, J. Camarero, J. Vogel, J.F. Peters, N.B. Brookes, J.B. Goedkoop, *Applied Surface Science* 254 (2007) 335.
- [4] J. Camarero, E. Jiménez, J. Vogel, C. Tieg, P. Perna, A. Bollero, F. Yakhou-Harris, C. Arm, B. Rodmacq, E. Gautier, S. Auffret, B. Delaup, G. Gaudin, B. Dieny, R. Miranda, *Journal of Applied Physics* 109 (2011) 07D357.

CT2.- Raman spectroscopy as metrological tool in the study of carbon nanostructures: a tutorial

Erlón Henrique Martins-Ferreira

Materials Metrology Division-INMETRO, Santa Alexandrina St. 416, Rio Comprido, RJ 20261-232, Brasil

E-mail: ehferreira@inmetro.gov.br

The needs of specific information about the chemical composition of objects, surfaces, solutions, among others, have stimulated the great development of the instrumentation in the last decades, especially in the field of Raman spectroscopy (RS) as its non-destructive and non-invasive characteristics are an extra bonus. The development of cheap and friendly user apparatuses has contributed to further increase the application of RS beyond the research laboratories, arriving at the pharmaceutical industry, hospitals, museums, forensic departments, just to cite a few.

This tutorial will address the basics of RS theory and instrumental aspects, focusing on how Raman spectra acquired by different equipment may present some divergences due to the specific nature of the measurement. The role of each part of the apparatus will be detailed, and the importance of the correct calibration will also be presented. Some other common issues such as fluorescence, sample preparation, stray light and cosmic rays are also on this topic.

The use of RS in the study of carbon nanostructures such as graphene, carbon nanotubes, and fullerene will be presented, focusing on some of the work done at the Materials Metrology Division, in Inmetro (Brasil). RS is the most common technique used to study carbon materials and it is also the most suitable to study the presence of defects and other discordances in such materials. We will see how RS can give not only qualitative but also quantitative information about the structure of those materials, and how this can be used in quality control.

Comunicaciones Orales

***Propiedades cristalográficas, electrónicas
y magnéticas de superficies***

CO1.- Fases estructurales en superficies de ceria reducida

**Gustavo E. Murgida,^{1,2} Valeria Ferrari,^{1,2} Ana M. Llois,^{1,2} Reinhard Olbrich,³
Clemens Barth,⁴ Michael Reichling,³ María V. Ganduglia-Pirovano⁵**

*1.- Departamento de Física de la Materia Condensada, GfYA, CAC-CNEA,
1650 San Martín, Buenos Aires, Argentina*

2.- CONICET, 1033 Buenos Aires, Argentina

3.- Fachbereich Physik, Universitat Osnabruck, Barbarastr. 7, 49076 Osnabruck, Alemania

4.- CNRS-UMR 7325, CINaM y Aix-Marseille Université, 13288 Marsella, Francia

5.- Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, 28049 Madrid, España

Email: murgida@tandar.cnea.gov.ar

La ceria (CeO_2) se destaca entre los óxidos reducibles por su gran facilidad para absorber y liberar oxígeno mediante las transformaciones reversibles $\text{CeO}_2 \leftrightarrow \text{CeO}_{2-x} \leftrightarrow \text{Ce}_2\text{O}_3$, que suceden en función de la temperatura y de la presión parcial de oxígeno. Debido a esta cualidad, la ceria es ampliamente utilizada en aplicaciones catalíticas, es empleada también en sensores y en celdas de combustible basados en ceria, y existen propuestas para desarrollar nuevas aplicaciones como compuertas lógicas y dispositivos espintrónicos. El conocimiento y el control de la distribución de vacancias de oxígeno y de las cargas liberadas durante la formación de vacancias en la superficie de ceria es fundamental para la optimización y el desarrollo de estas aplicaciones, y especialmente de los procesos catalíticos. En ceria bulk reducida, existen cuatro fases estables cuyas estequiometrías y estructuras cristalográficas son conocidas desde hace varias décadas: Ce_7O_{12} , $\text{Ce}_{11}\text{O}_{20}$, Ce_2O_3 hexagonal y Ce_2O_3 bixbita. Recientemente, mediante el empleo de imágenes STM, AFM y de espectroscopia LEED, se identificaron estructuras superficiales de vacancias en superficies (111) de ceria reducida con las periodicidades 1×1 , $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$, 3×3 y 4×4 . En este trabajo, en el marco de la teoría de la densidad funcional y de la mecánica estadística, mostramos que las periodicidades 1×1 , $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ y 4×4 pueden ser identificadas como reconstrucciones delgadas de las fases bulk conocidas. Por razones geométricas, la estructura 3×3 , no puede ser asociada a ninguna de estas fases de volumen. Sin embargo, mostramos que la estructura superficial 3×3 corresponde a una nueva estructura bulk cuasiestable con estequiometría Ce_3O_5 que no fue anteriormente reportada. Analizando la energía de Gibbs de diferentes estructuras superficiales, mostramos que una capa delgada de la estructura propuesta de Ce_3O_5 sobre ceria sin reducir es estable en un rango amplio de condiciones reductoras de presión y temperatura.

CO2.- Distribución de alturas de barreras intergranulares en semiconductores policristalinos

Camila Buono, Federico Schipani, Miguel A. Ponce, Celso M. Aldao

*Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA),
Avda. J.B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata, Argentina
Email: cbuono@mdp.edu.ar*

El carácter puntual y distribución al azar de las impurezas en las zonas de deserción afectan directamente las barreras tipo Schottky que se forman en las superficies e interfaces semiconductoras. En particular, los gráficos de Arrhenius para la conductividad eléctrica, tanto para contactos metal-semiconductor como para contactos semiconductor-semiconductor, se curvan debido a las fluctuaciones en las alturas de barrera. Estos resultados se pueden ajustar suponiendo que el mecanismo de conducción es termoiónico con una distribución gaussiana de alturas de barrera. Sin embargo, mediante un modelado computacional, encontramos que las fluctuaciones de las alturas de barrera no presentan una distribución gaussiana. Más aún, con las alturas encontradas no es posible explicar la dependencia de la conductividad con la temperatura mediante una conducción termoiónica. Por el contrario, un mecanismo de conducción túnel presenta la dependencia observada experimentalmente sin recurrir al efecto de fluctuaciones.

***Adsorción de átomos y moléculas,
crecimiento de monocapas y estructuras
de baja dimensionalidad***

CO3.- Caracterización de materiales nanoestructurados de sílice mediante simulación Monte Carlo

Victor Yelpo, Valeria Cornette, Raúl López

*Instituto de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Físico Matemática y Naturales,
Departamento de Física (UNSL), San Luis, Argentina
Email: victoryelpo@gmail.com*

Los materiales mesoporosos ordenados (*MMO*) juegan un importante rol tecnológico debido a sus aplicaciones químicas, bioquímicas y medioambientales desempeñándose como soportes catalíticos y adsorbentes, particularmente en reacciones que involucran moléculas grandes. En particular, materiales mesoporosos de sílice han atraído una gran atención en la ciencia de materiales debido a sus propiedades texturales y morfológicas tales como altas superficies específicas, grandes volúmenes de poro, estrecha distribución de tamaño de poro, poros de gran tamaño y estructura de poro regular. Como consecuencia, estas estructuras de sílice permiten el acceso a moléculas de gran tamaño y presentan mejores actividades catalíticas y capacidades de adsorción en comparación con los materiales microporosos.

Entre los *MMO* se encuentra la *SBA-15* ("*Santa Barbara Amorphous*"), uno de los más estudiados, no solo por su alta regularidad estructural, sino también por los diversos tamaños de poros y espesores de pared que pueden ser obtenidos en este tipo de materiales empleando condiciones apropiadas de síntesis.

En este trabajo se proponen diferentes modelos para modelar la superficie adsorbente y se caracterizan diferentes materiales mediante la determinación de la distribución de tamaños de poro y desde el punto de vista energético a través de la entalpía de adsorción. Los resultados obtenidos por medio de simulación de Monte Carlo en el Gran Canónico son contrastados con datos experimentales obteniendo un muy buen acuerdo.

CO4.- Evolución de la estructura electrónica durante el crecimiento epitaxial de *Au* sobre *Pt*(001)

**Silvina Bengió,^{1,2} Lukasz Walczak,² Ivana Vobornik,³
Pilar Segovia,² Enrique García-Michel²**

1.- CONICET and Centro Atómico Bariloche, Avda. E. Bustillo Km 9.8,
R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

2.- Departamento de Física de la Materia Condensada,
Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, España

3.- TASC National Laboratory, CNR-INFN, S.S. 14 Km 163.5, I-34012 Trieste, Italia
Email: silvina.bengio@cab.cnea.gov.ar

Las propiedades electrónicas y estructurales de *Au*, *Pt* y sus aleaciones en el rango nanométrico han sido tema de continuo interés en los últimos años debido a sus interesantes propiedades, que incluyen el comportamiento electrónico, complejas reconstrucciones y la actividad catalítica [1,2]. El presente estudio comprende un análisis de la evolución de la estructura electrónica con el cubrimiento de *Au* sobre la superficie reconstruida de *Pt*(001) en el rango 1-10 ML con ARPES, incluyendo superficies de Fermi, y combinado con información estructural de LEED. El *Au* crece epitaxialmente sobre la superficie *Pt*(001) en un modo cuasi capa a capa, con un patrón (1×1) hasta 4-5 ML. Se estudió la evolución de la estructura electrónica cerca del punto superficial X en función del cubrimiento de *Au*. Para cubrimientos de 1-3 ML se identificaron estados electrónicos de interface debido a la formación de la aleación *Au-Pt*. A partir de 2 ML, se identificaron estados de pozo cuántico (QWS) provenientes de la incipiente banda *sp* del *Au*, que convergen a la banda *sp* de volumen en ~6 ML. A partir de 4-5 ML se observa un patrón (1×7) debido a la formación de una reconstrucción superficial en la película de *Au*, donde la última capa atómica tiene simetría hexagonal como en el caso de la reconstrucción superficial de *Au*(001). Se identificaron estados de superficie con un carácter cuasi-unidimensional provenientes de esta última capa reconstruida. El origen de la reconstrucción observada en estos sistemas podría ser la ganancia electrónica originada por la apertura de gap de los estados quasi-1D. Estos resultados proveen de una imagen completa de la estructura electrónica del crecimiento de *Au* sobre *Pt*(001), incluyendo la formación de la banda *sp*, hibridización y confinamiento electrónico. Sin duda estos mecanismos electrónicos podrían afectar la actividad catalítica de otros sistemas formados por capas de *Au* y también podrían evidenciarse en *NP*'s.

[1] M. Chen, Y. Cai, Z. Yan, D.W. Goodman, *Journal of the American Chemical Society* 128 (2006) 6341.

[2] S. Bengió, V. Navarro, M.A. González-Barrio, R. Cortés, I. Vobornik, E. García-Michel, A. Mascaraque, *Physical Review B* 86 (2012) 045426.

CO5.- Adsorción y reactividad de acetol sobre monocristales metálicos y películas delgadas de óxidos: desde UHV a condiciones de presión del orden de mTorr

**Florencia C. Calaza,^{1,4} Osman Karslioglu,² Hendrik Bluhm,²
Martin Sterrer,^{1,3} Hajo Freund¹**

1.- Fritz-Haber-Institute for the Max-Planck-Society, 14195 Berlin, Germany

2.- Chemical Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, CA 94720 Berkeley, USA

3.- Institute of Physics, Karl-Franzens-Universität Graz, A-8010 Graz, Austria

4.- Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Universidad Nacional del Litoral and CONICET, Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

Email: fc Calaza@intec.unl.edu.ar

El empleo de fuentes renovables de origen vegetal para producir químicos y energía, aparece como una alternativa tecnológica promisorio para resolver la dependencia de combustibles a partir de fósiles, surgiendo así el nuevo concepto de bio-refinerías. Durante la producción de biodiesel por conversión de biomasa, cerca del 10 % de co-producto es Glicerol en cantidades que superan la demanda por lo que pasa a considerarse un desecho y surge así el compromiso de buscar nuevos procesos para convertir este producto secundario a compuestos químicos de mayor valor agregado. El glicerol está altamente funcionalizado y puede ser usado como materia prima para una gran variedad de productos químicos de interés industrial. Un ejemplo es la obtención de glicoles propilénicos mediante deshidratación de glicerol a acetol seguida de su hidrogenación al diol en exceso de H_2 [1]. Es sabido que los metales preciosos son excelentes hidrogenantes catalíticos, pero recientemente se encontró que algunos óxidos también presentan alta reactividad para reacciones de hidrogenación, uno de ellos es CeO_2 siendo este altamente selectivo en la semi-hidrogenación de C_2H_2 a C_2H_4 [2]. Se propuso que el rol principal del óxido es mantener los intermediarios CH_x superficiales espacialmente bien distribuidos para evitar su oligomerización, a expensas de una barrera de activación de H_2 más alta en comparación con los catalizadores metálicos [3,4]. En el presente trabajo estudiamos la adsorción de acetol sobre monocristales de $Pd(111)$, $Ru(0001)$, y películas de $CeO_2(111)$, que representan nuestras superficies catalíticas modelo, para elucidar los caminos de adsorción y reacción. Combinando varias técnicas de superficies que pueden ser usadas en condiciones atmosféricas, podemos extender nuestro análisis desde condiciones de ultra alto vacío (UHV) hasta condiciones de reactividad más reales, cercanas a presión ambiente (mTorr). Usamos NEXAFS y AP-XPS para observar el estado químico de la superficie e intermediarios moleculares adsorbidos y PEM-IRAS que permite diferenciar vibraciones características de especies adsorbidas de los compuestos en la fase gaseosa. La adsorción de Acetol difiere entre los dos metales estudiados, siendo Pd más reactivo que Ru para su descomposición. Especulamos sobre el rol de carbón co-adsorbido y/u oxígeno como las fuentes estabilizadoras de los adsorbatos. Para el caso de CeO_2 , este óxido reducible presenta diferentes reactividades dependiendo del estado de oxidación de sus cationes superficiales (Ce^{4+} o Ce^{3+}), lo cual es observado con las técnicas *in-situ* usadas.

[1] M. Dasari, P. Kiatsimkul, W. Sutterlin, G.J. Suppes, *Applied Catalysis A* 281 (2005) 225-231.

[2] G. Vilé, B. Bridier, J. Wichert, J. Pérez-Ramírez, *Angewandhte Chemie International Edition* 51 (2012) 8620-8623.

[3] G. Vilé, P. Dähler, J. Vecchiotti, M. Baltanás, S. Collins, M. Calatayud, A. Bonivardi, J. Pérez-Ramírez, *Journal of Catalysis* 324 (2015) 69-78.

[4] M. Verónica Ganduglia-Pirovano, *Catalysis Today* 253 (2015) 20-32.

CO6.- Transiciones no-aleadas/aleadas en el sistema $\text{Sn}/\text{Cu}(100)$ **Paloma Machaín, Julio E. Gayone, Javier D. Fuhr, Hugo Ascolani**

*Centro Atómico Bariloche, CONICET-CNEA, Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n,
R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina
Email: palomamachain@gmail.com*

Estudiamos las propiedades de adsorción de átomos de Sn depositados sobre la superficie $\text{Cu}(100)$ en condiciones de ultra-alto vacío mediante microscopia de efecto túnel (STM) y cálculos utilizando la teoría de funcional densidad (DFT) a través del paquete computacional Quantum Espresso [1]. Se conoce que la deposición de pequeñas cantidades de Sn (hasta 0.5 MC) sobre $\text{Cu}(100)$ a temperatura ambiente forma distintas fases de una aleación limitada sólo a la primera capa de la superficie [2]. El proceso fundamental en la formación de una aleación de superficie es el de intercambio de un átomo del sustrato ubicado en la última capa por un átomo adsorbido. Siendo el intercambio un proceso activado, es posible inhibir la formación de la aleación bajando la temperatura suficientemente.

En el caso del sistema $\text{Sn}/\text{Cu}(100)$ encontramos que la formación de la aleación de superficie es inhibida a temperaturas por debajo de 170 K. A partir de allí realizamos un estudio detallado de las fases no-aleadas en un rango de cubrimientos de hasta 0.65 MC encontrando dos reconstrucciones no conocidas hasta el momento. Determinamos además que el proceso de intercambio es activado a 200-240 K y que todas las estructuras no-aleadas transicionan a aleación superficial. Las cinco fases ordenadas ya conocidas a temperatura ambiente son recuperadas cuando se parte de las fases no-aleadas de baja temperatura, pero la morfología de la superficie resulta dependiente de la temperatura de depósito. Finalmente, estudiamos los procesos involucrados en las transiciones no-aleadas/aleadas con la ayuda del paronama energético del sistema $\text{Sn}/\text{Cu}(100)$.

[1] Quantum-Espresso is a community project for high-quality quantum-simulation software, based on density-functional theory, and coordinated by Paolo Giannozzi. See <http://www.quantum-espresso.org> and <http://www.pwscf.org>.

[2] A. Cafolla, E. McLoughlin, E. Al Shamaileh, P. Guaino, G. Sheerin, D. Carty, T. McEvoy, C. Barnes, V. Dhanak, A. Santoni, *Surface Science* 544 (2003) 121-133.

CO7.- Adsorción de dopamina sobre grafeno

Ana C. Rossi, Norberto J. Castellani

IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física - UNS,
Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina
Email: anarossi@ifisur-conicet.gov.ar

La detección de moléculas de interés biológico ha sufrido en los últimos años un notable avance debido a la incorporación de técnicas que utilizan materiales de elaboración nanotecnológica como nanopartículas semiconductoras, nanohilos semiconductores y nanotubos de carbono. En particular, para la detección de dopamina, importante neurotransmisor del sistema nervioso central, recientemente se ha recurrido al uso de voltamogramas en electrólisis de alta resolución mediante electrodos basados en grafeno. En el presente trabajo se estudia la adsorción de dopamina neutra sobre la superficie de grafeno perfecta y con monovacancias mediante el paquete de cálculo VASP (*“Vienna Ab-Initio Simulation Package”*) dentro del formalismo *“Density Functional Theory”*. La superficie se representó usando un modelo de *“slab”* donde el grafeno se replica en la dirección normal a la superficie mediante un gap de 25 Å. En los cálculos se tuvieron en cuenta los efectos debidos a las interacciones de tipo vdW mediante el método de Grimme y mediante el método vdW-DF debido a Langreth y Lundquist. La supercelda de grafeno perfecta utilizada posee 50 átomos de carbono. Se consideraron diversos modos de adsorción de la molécula de dopamina resultando que los modos en que la molécula se dispone paralelamente a la superficie son más estables que en los que se dispone perpendicularmente. En el caso de la superficie de grafeno regular los valores de energía de adsorción y las distancias interatómicas son compatibles con una adsorción de carácter fisisortivo, pero en el caso de la monovacancia la interacción es más significativa debido a la presencia de una unión puente de hidrógeno en la que interviene un átomo de hidrógeno de uno de los hidróxilos de la dopamina. Estas interacciones atractivas deben competir con una importante repulsión covalente entre los orbitales π del anillo de la molécula de dopamina y aquellos del grafeno. Se estudió la interacción adsorbato-substrato analizando la diferencia de densidades de cargas electrónicas con respecto a los fragmentos componentes, las energías electrostáticas involucradas y las densidades de estados de energía. Las interacciones de tipo no-covalente se analizaron mediante el método NCI, donde se pueden diferenciar las regiones predominantemente con enlace vdW y aquellas con enlace puente de hidrógeno.

CO8.- Competición entre dos ensambles de feniltioles sobre $Au(111)$ Leonardo F. Peiretti,¹ Frederik Tielens,² Paola Quaino¹

1.- PRELINE, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral,
S3000AOM Santa Fe, Argentina

2.- Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, Collège de France, Laboratoire de Chimie de la
Matière Condensée de Paris, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France
Email: lfpeiretti@fiq.unl.edu.ar

La interacción entre tioles aromáticos y una superficie de $Au(111)$ se investigó utilizando DFT periódico. Se investigaron diferentes arreglos de monocapas autoensambladas (SAM's) en una superficie de $Au(111)$ plana y otra con adátomos (nanoestructurada). La interpretación de las diferencias entre las energías de adsorción y la naturaleza del enlace $Au-S$ se realizó mediante la Densidad de Estados Proyectada (PDOS) y el método "Crystal Orbital Hamilton Population" (COHP) para las SAM's optimizadas geométricamente. La diferencia de energía de adsorción entre los aril tioles adsorbidos sobre la superficie nanoestructurada (configuración en "T"), respecto de la superficie plana (configuración en paralelo), decrece al disminuir el largo de la cadena carbonada. Esto indicaría que la reconstrucción superficial, desde plana a nanoestructurada [1,2], se hace menos favorable para los aril tioles de cadena corta. Más aún, se encontró que la naturaleza del enlace $Au-S$ es independiente del largo de la cadena, lo cual nos lleva a concluir que la reconstrucción superficial, si sucede, sólo depende de las interacciones entre cadenas.

[1] Y. Wang, N.S. Hush, J.R. Reimers, *Journal of the American Chemical Society* 129 (2007)14532-14533.

[2] X. Fan, X. Fang, R. Ran, W.M. Lau, *Physica E Low-dimensional Systems and Nanostructures* 59 (2014) 248-253.

CO9.- Consideraciones para el estudio de películas delgadas y moléculas orgánicas no conductoras mediante microscopia de efecto túnel

Sandra M. Mendoza

Universidad Tecnológica Nacional (UTN), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Facultad Regional Reconquista, Calle 44 N° 1000, 3560 Reconquista, Argentina
Email: smendoza@frq.utn.edu.ar

La microscopia de efecto túnel (STM) es una técnica destinada al estudio de superficies y a la adquisición de imágenes con resolución atómica y molecular, que se basa en el control del flujo de corriente eléctrica producida por efecto túnel. Por ello, en principio, esta técnica no permite analizar muestras eléctricamente no conductoras. Sin embargo, debido al efecto túnel es posible estudiar moléculas orgánicas o películas delgadas no conductoras depositadas sobre sustratos eléctricamente conductores. En este tipo de muestras, la corriente por efecto túnel se establecerá entre la punta de la sonda del STM y el sustrato conductor. Esto es factible bajo condiciones instrumentales específicas. Pero debe tenerse en cuenta que la punta puede penetrar la película no conductora, induciendo alteraciones o imposibilitando obtener imágenes de alta resolución. Por lo tanto, la clave para adquirir imágenes con resolución molecular radica en usar corrientes túneles muy bajas (de unos pocos picoamperes). A iguales voltajes, una menor intensidad de corriente túnel significa mayor distancia entre punta y sustrato. Así, el control de las condiciones experimentales de escaneo permiten mantener la punta lo más retirada posible de la superficie para estudiar la película no conductora de interés. En este trabajo se exponen ejemplos de sistemas orgánicos no conductores (rotaxanos, alcanotioles y macromoléculas) sobre sustratos conductores, analizados por STM en medio líquido o en condiciones atmosféricas. Se brindan detalles experimentales para la adquisición de imágenes y se muestran diferencias al trabajar con bajas y altas corrientes túneles, así como también con películas ultra delgadas de diferentes espesores.

**CO10.- Determinación del tamaño de partícula mediante XPS
en catalizadores soportados de Rh y Ni****Ana M. Tarditi, Leandro Coronel, John F. Múnera, Laura M. Cornaglia**

*Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE, UNL-CONICET), Facultad de Ingeniería
Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: lmcornag@fiq.unl.edu.ar*

El reformado de etanol con vapor involucra varias reacciones paralelas, siendo los depósitos carbonosos los principales responsables de la desactivación de los catalizadores [1]. Los sólidos más estables están basados en metales nobles, sin embargo el Ni y el Co son alternativas viables debido a su bajo costo. Por otra parte, el soporte empleado debe poseer elevada área superficial para lograr partículas metálicas pequeñas, y comportamiento levemente básico, para inhibir la deshidratación del etanol. Los catalizadores de Rh soportados en sistemas binarios La_2O_3 - SiO_2 reúnen estas propiedades y han sido empleados en el reformado de etanol con vapor [2] con buenos resultados. En este trabajo se estudian la composición superficial y los estados de oxidación del Rh mediante XPS, aplicando el modelo de Davis para estimar el tamaño de partícula del Rh metálico. Este modelo [3] considera la relación de intensidades de los picos de dos niveles internos de la misma fase dispersa suficientemente separados en energía. Los espectros de XPS de los catalizadores Rh/ La_2O_3 - SiO_2 reducidos en la cámara de reacción a 400 °C presentaron un sólo pico de Rh $3d_{5/2}$ a 306.7 ± 0.1 eV, indicando que el Rh se encuentra completamente reducido. Para aplicar el modelo el modelo de Davis se consideraron los picos característicos de Rh 3d y el pico Auger de Rh_{MNV} . Los tamaño de partículas estimados estuvieron entre 1.2 y 2.5 nm y fueron corroborados mediante quimisorción de CO. Por otra parte, se observó que el catalizador con 40 % de La_2O_3 usado en reacción sufre una oxidación del rodio en la superficie, a diferencia del Rh/ La_2O_3 (15%)- SiO_2 que permanece en estado reducido. Este catalizador posee un tamaño de partícula mayor indicando que la resistencia a la oxidación aumenta con el tamaño de partícula. La oxidación del metal puede ser una de las principales causas de la pérdida de actividad de los catalizadores.

El modelo de Davis también se empleó para la estimación del tamaño de partícula de Ni(0) en catalizadores Ni/ $MgAl_2O_4$, dopados con Ce o Pr, después de diferentes tratamientos en atmósferas inertes y reductoras [4]. Los resultados obtenidos muestran que después del tratamiento en hidrógeno ocurre un importante aumento del tamaño de partícula de 22 a 34 nm en los sólidos promovidos con Pr. Mientras que, en los dopados con Ce, el tamaño de partícula del Ni cercano a 25 nm, no se modifica. La sinterización del metal en estas condiciones puede ser una de las causas de la pérdida de actividad y formación de carbón de estos sólidos en el reformado de etanol con vapor.

En este trabajo se empleó el modelo de Davis para determinar el tamaño de partícula de Rh y Ni mostrando en ambos casos una buena correlación con resultados obtenidos por otras técnicas, lo que sugiere la potencial aplicación de este modelo en catalizadores soportados.

[1] L.V. Mattos, G. Jacobs, B.H. Davis, F.B. Noronha, *Chemical Review* 112 (2012) 4094-4123.

[2] L. Coronel, A.M. Tarditi, J.F. Múnera, L.M. Cornaglia, *Applied Catalysis B Environmental* 160-161 (2014) 254-266.

[3] M. Davis, *Journal of Catalysis* 117 (1989) 432-466.

[4] A.M. Tarditi, N. Barroso, A.E. Galetti, L.A. Arrúa, L.M. Cornaglia, M.C. Abello, *Surface & Interface Analysis* 46 (2014) 521-529.

Reacciones Químicas en Superficies

CO11.- Estudio teórico y experimental comparativo de oxidación de CO sobre sistemas Pt/titania fase pura y fase mixta

Gabriela F. Cabeza,^{1,2} Cecilia I.N. Morgade,¹⁻³ Charito Vignatti⁴

1.- IFISUR, UNS-CONICET, Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina

2.- Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina

3.- FRBB, Universidad Tecnológica Nacional, 11 de Abril 461, B8000LMI Bahía Blanca, Argentina

4.- INCAPE, CONICET-UNL - Colectora Ruta Nacional N° 168 Km 472.4,

Paraje El Pozo, S3000ADQ Santa Fe, Argentina

Email: ceciliamorgade@yahoo.com.ar

Es sabido que la fotocatalisis involucra tres procesos: la activación a partir de la radiación fotónica de energía adecuada, la difusión de los transportadores de carga a las zonas de reacción y la reacción redox que involucra electrones o huecos generados y reactivos adsorbidos en la superficie del catalizador. Sólo la migración hacia la superficie permite a las cargas generadas participar en las reacciones óxido-reductoras deseadas.

Siendo la recombinación de cargas uno de los factores que disminuyen la actividad de un fotocatalizador, las muestras de fases mixtas parecerían ser más activas por facilitar la separación espacial de las cargas generadas.

El tratamiento teórico de la unión entre semiconductores diferentes puede dividirse en tres categorías. La primera consiste en reglas empíricas basadas en determinadas propiedades experimentales de las relaciones: semiconductor-vacío, semiconductor-metal o semiconductor-semiconductor. La segunda basada en cálculos teóricos de las estructuras de bandas de los semiconductores que tratan la interfaz como parámetros del “bulk” independientes de la estructura específica de la misma y que asume que los estados electrónicos de cada semiconductor pueden ser ubicados en una escala energética común. La tercera incluye aquellas que consideran a los componentes de la heterounión en un sólo cálculo. Entre las primeras pueden mencionarse las reglas empíricas de afinidad electrónica o la regla de aniones comunes. La teoría de alineación por anión común tiene su motivación física en la característica en común de las bandas de valencia de la mayoría de los semiconductores que presentan en general carácter *p* no metálico. En el trabajo original de Mc Caldin [1] proponen que las barreras de Schottky estarían determinadas mayoritariamente por las electronegatividades de los aniones que permitirían alinear las bandas de valencia.

En este trabajo se presentan los resultados de un estudio teórico de alineación de bandas entre las fases anatasa y rutilo de la titania (TiO_2) realizado a partir de cálculos ab-initio empleando la Teoría de la Funcional densidad (DFT+U) y la teoría de alineación por ión común. También se muestran resultados experimentales comparativos (DRIFTS) obtenidos para la reacción de oxidación del CO sobre sistemas Pt/A (anatasa pura) y Pt/AR (anatasa-rutilo) como parte de una de las reacciones implicadas en la reacción de “water gas shift” (WGS).

[1] J. Mc Caldin, T. Mc Gill, C. Mead, *Physical Review Letters* 36 (1976) 56.

CO12.- Naturaleza química de nanoestructuras plasmónicas sintetizadas por la reducción de Au (III) con especies de sulfuro

**María A.C. Huergo,¹ Lisandro Giovanetti,¹ Félix G. Requejo,¹ Sergio Moreno,²
Roberto C. Salvarezza,¹ Carolina Vericat¹**

1.- Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicada (INIFTA),
Calle 64 y Diagonal 113 s/n, 1900 La Plata, Argentina

2.- Centro Atómico de Bariloche (CNEA), Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n,
R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

E-mail: mahuergo@inifta.unlp.edu.ar

La síntesis de nanoestructuras a partir de la reducción de Au (III) con sulfuro de sodio da origen a la formación de partículas de diferente tamaño y morfología con propiedades ópticas de interés en Nanomedicina. Los espectros de extinción de estas nanopartículas (NP's) muestran que el sistema presenta dos picos de resonancia de plasmones superficiales (SPR): uno en la región del verde (~ 530 nm) y otro en la región del infrarrojo cercano (NIR), siendo este de gran interés en terapias de hipertermia, o de "drug-delivery" [1,2]. Por medio de la separación con láseres de diferente longitud de onda hemos podido determinar unívocamente que las NP's responsables del primer pico de SPR son NP's esféricas de 20-40 nm de diámetro mientras que las partículas responsables del pico en la región del NIR resultaron ser de tipo bidimensional [3]. Sin embargo, hasta ahora, la naturaleza química de esta reacción ha generado controversias entre diferentes autores [1,2,4]. En el presente trabajo se muestra la composición química de estas estructuras con diferentes técnicas fisicoquímicas. La espectroscopia de absorción de rayos-X cercana al borde de absorción (XANES), en el borde Au-L₃, muestra la presencia de Au metálico, descartando la existencia de especies oxidadas de Au, en particular la formación de partículas "core@shell" del tipo Au₂S@Au. El análisis por microscopia electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) confirma estos resultados y permite caracterizar la estructura cristalina de cada tipo de nanoestructura, descartando nuevamente la existencia de NP's de tipo "core@shell". La difracción de electrones de áreas seleccionadas (SAED) de las imágenes muestra que las estructuras bidimensionales están principalmente formadas por planos de Au{111}, mientras que las NP's esféricas son estructuras de oro de tipo cubo-octaédricas. El análisis de XANES de S-K muestra la presencia de especies similares a las que se encuentran sobre superficies de Au planas, fundamentalmente polisulfuros adsorbidos. De este modo, podemos afirmar que todas las nanoestructuras formadas son de oro metálico recubiertas de polisulfuros. La completa caracterización de estas NP's permite entonces avanzar hacia la aplicación de estas estructuras, por sus propiedades en la región del NIR, al campo de la de biomedicina.

[1] H. Zhou, I. Honma, H. Komiyama, J. Haus, *Physical. Review B* 50 (1994) 12052-12057.

[2] Y. Mikhlin, M. Likhatski, A. Karacharov, V. Zaikovski, A. Krylov, *Physical Chemistry Chemical Physics* 11 (2009) 5445-5454.

[3] M.A.C. Huergo, C. Maier, M. Castez, C. Vericat, R.C. Salvarezza, A. Urban, J. Feldmann, *ACS Nano* 10 (2016) 3614-3621.

[4] M. Tan, J. Ying, G. Chow, *Journal of Material Research* 23 (2008) 281-293.

CO13.- Comportamiento de óxido de grafeno en medio básico. Estructura química

Maximiliano A. Zensich, Fernando Fungo, Gustavo M. Morales

Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto, Ruta Nacional 36 Km. 601,
X5804BYA Río Cuarto, Córdoba, Argentina
Email: mzensich@exa.unrc.edu.ar

El óxido de grafeno (*GO*) es un nanomaterial bidimensional, perteneciente a la familia del grafeno, cuya estructura química es la de un grafeno modificado con grupos funcionales oxigenados. Al igual que el grafeno, el *GO* es uno de los materiales más estudiados de la última década debido a sus propiedades, lo que permite numerosas aplicaciones. A pesar de los grandes esfuerzos realizados, y por tratarse de un material no estequiométrico e inestable aún en condiciones ambiente, su estructura química real y lo más importante, como controlarla, es objeto de debate en la comunidad científica [1,2]. Uno de los modelos propone para el *GO* una estructura de dos componentes: (a) grandes láminas de grafeno con unos pocos grupos oxidados y (b) pequeñas moléculas orgánicas policíclicas con un gran contenido de grupos funcionales más conocidos como “*oxidation Debris*” (OD).

En este trabajo se mostrará evidencia de la existencia de reacción química, y por tanto modificación de la estructura del *GO*, al emplear protocolos de purificación generalizados en la literatura. Esto ha producido una gran confusión en el área, y se le han asignado a nuestro criterio erróneamente, propiedades y efectos ópticos, mecánicos y electrónicos a la presencia de los OD. Nuestros datos de análisis químico, espectroscópicos y morfológicos muestran que bajo las condiciones de purificación empleadas el *GO* se reduce.

[1] J.P. Rourke, N.R. Wilson, *Carbon* 96 (2016) 339-341.

[2] A.M. Dimiev, T.A. Polson, *Carbon* 93 (2015) 544-554.

CO14.- Propiedades superficiales de nanocompuestos de almidón termoplástico nativo reforzado con montmorillonita-extracto de arándano

Tomy J. Gutiérrez, Vera A. Álvarez

*Grupo de Materiales Compuestos de Matriz Polimérica (CoMP), Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata (UNMdP) y CONICET, Solís 7575, B7608FLC Mar del Plata, Argentina
Email: tomy.gutierrez@fi.mdp.edu.ar*

El uso de polisacáridos tales como almidón para la formulación de nuevos materiales biodegradables representa una alternativa ecológica a los polímeros derivados del petróleo [1]. Sin embargo, la alta sensibilidad a la humedad, fragilidad y dificultad de procesamiento son algunas desventajas por solventar. Con el propósito de obtener materiales compuestos mejorados a partir de almidón termoplástico se diseñaron seis materiales con diferentes agregados a partir de arcillas nativa y modificada con y sin adición de extracto de arándano. El objetivo de este trabajo fue estudiar las propiedades superficiales y fisicoquímicas de películas de almidón termoplásticos obtenidas por mezcla seguida de termo-compresión, las cuales han sido escasamente estudiadas [2]. Las películas fueron caracterizadas en términos de análisis termogravimétrico (ATG), humedad superficial, ángulo de contacto, microscopia de fuerza atómica (AFM), opacidad y parámetros de color. Los resultados obtenidos sugieren que las arcillas evitan las interacciones enlace de hidrógeno entre las cadenas de almidón, evitando así la retrogradación del almidón. Esto condujo a la obtención de materiales con superficies más suaves e hidrofílicas, independientemente del tipo de arcilla. No obstante, aparentemente la arcilla nativa posee mejores propiedades de adhesión compuesto-matriz. Finalmente, las propiedades superficiales de estos materiales fueron definidas por la energía superficial del material que depende de las interacciones intermoleculares que ocurren por debajo de la superficie, tales como las interacciones tipo fuerzas de Van der Waals (enlace de hidrógeno) entre los compuestos de la matriz polimérica-arcilla.

[1] T.J. Gutiérrez, J. Suniaga, A. Monsalve, N.L. García, *Food Hydrocolloids* 54 (2016) 234-244.

[2] T.J. Gutiérrez, G. González, *Food and Bioprocess Technology*, en prensa (2016).

***Biomoléculas sobre superficies e
interfaces de interés biológico***

CO15.- Control de la adhesión celular mediante películas poliméricas naturales**Nicolás E. Muzzio,¹ Miguel A. Pasquale,¹ Sergio E. Moya,² Omar Azzaroni¹**

1.- Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, UNLP-CONICET),
Calle 64 Diag. 113, 1900 La Plata, Buenos Aires, Argentina

2.- Soft Matter Nanotechnology Group, CIC biomaGUNE, Paseo Miramón 182 C,
20009 San Sebastián, Gipuzkoa, Spain
Email: nemuzzio@inifta.unlp.edu.ar

Las técnica de “capa a capa” permite obtener en forma sencilla películas de polielectrolito en las que los mismos se ensamblan mediante interacciones mayoritariamente electrostáticas. Resulta versátil para modificar superficies incorporando componentes específicos capaces de afectar el fenotipo celular. Las películas de polielectrolitos naturales suelen presentar baja adhesión celular, siendo una desventaja para determinadas aplicaciones. Para soslayar este inconveniente generalmente se recurre a modificar químicamente la estructura de las películas o incorporar materiales que aumenten la rigidez de las películas, y consecuentemente la adhesión celular. Estos procedimientos involucran sustancias que no son biocompatibles además de complicar la fabricación de las películas.

En esta contribución se presenta una alternativa para mejorar la adhesión celular sobre estas películas, basada en la reestructuración inducida por tratamiento térmico pos-ensamblado. Se emplea poli-L-lisina (PLL) y ácido algínico (Alg) como policación y polianión, respectivamente. Las películas estudiadas contienen 15 capas, terminando en todos los casos en PLL. El tratamiento térmico se realiza sometiendo las películas durante tres días a 37, 50 y 80 °C. El cambio producido en las propiedades fisicoquímicas de las películas se analiza mediante microbalanza de cristal de cuarzo con disipación (QCM-D), microscopia de fuerza atómica (AFM), espectroscopia de fuerza atómica (AFS), potencial zeta y medidas de ángulo de contacto. Se utilizan mioblastos murinos C2C12 y células epiteliales A549 de carcinoma alveolar humano para evaluar la adhesión celular sobre las superficies con y sin tratamiento térmico. Se mide el área celular, las características geométricas de las células, y el número y tamaño de los contactos focales por medio de imágenes de inmunofluorescencia.

Después del tratamiento térmico, las películas resultan ser más compactas y con una mayor rigidez, el módulo de Young se incrementa un orden de magnitud. Además, el carácter hidrofóbico aumenta, siendo el ángulo de contacto de $36 \pm 3^\circ$ en las películas sin tratamiento y de entre 50 y 100 grados luego del tratamiento térmico. El potencial zeta se vuelve más negativo luego del tratamiento térmico, siendo cercano a cero en las superficies recién ensambladas y de -14 mV luego del tratamiento a 37 °C. El efecto de la estructuración térmica también se pone de manifiesto en la disminución en la adsorción de proteínas. El conjunto de resultados permite proponer un modelo en el que el tratamiento térmico aumenta la movilidad de los polielectrolitos y promueve la formación de complejos, resultando una mayor carga negativa debido a la diferencia de los pesos moleculares entre el policación y el polianión. Los cambios en las propiedades de la película producen un aumento significativo en la adhesión celular para ambas líneas celulares.

Los resultados presentados indican que el tratamiento térmico realizado sobre las películas de PLL/Alg puede utilizarse para modular la adhesión celular de una manera simple y sin cambiar la composición y biocompatibilidad de estos sistemas con potenciales aplicaciones en el campo de la ingeniería de tejidos.

Comunicaciones Orales de Empresas

COE1.- HiPP-Lab, a versatile setup for APPES measurements

William Fadgen

*SCIENTA-OMICRON L.A. - Quantum Design Inc., 10307 Pacific Center Court,
CA 92121-3733 San Diego, USA
Email: bfadgen@qdusa.com*

We present a versatile setup designed for APPES measurements. The instrument is based on the exchangeable chamber concept that allows for a modular and flexible setup that allows for a range of different experiments to be performed using the same setup, without having to compromise with the design. A background on APPES measurements and the challenges of getting results will be presented, as well as the current results from users of the system around the world.

The instrument is based on the XM1200 high power X-ray source in combination with the HiPP-3 APPES analyzer. This analyzer is equipped with the swift acceleration mode that has been shown to enhance the intensity 10 times for a silver sample in 8 mbar of water compared to the standard mode of operation (Edwards NIMA785 2015 191). The analyzer is further equipped with image mode that has a lateral resolution along the slit. This resolution has been demonstrated to be 3.5 μm using a sample of gold stripes on a silicon oxide substrate.

CEO2.- Innovations in TEM and XPS

Rafael G. Torres-Leal

*JEOL BRASIL Instrumentos Científicos Ltda., Avda. Jabaquara 2958,
5º andar conjunto 52, SP 04046-500 São Paulo, Brasil
Email: rafael.leal@jeol.com.br*

Investigations about the structure of matter have attracted the attention of mankind for generations. However, the knowledge of structure of materials has always been linked to the availability and improvement of experimental techniques. Thus, a detailed knowledge of micro and nanostructure of the matter is only possible by using high resolution analytical systems, more and more powerful. This study intends to present the latest tools and techniques related to TEM and XPS and its impact on current Science.

CEO3.- Starting up from the surface

Gerardo R. Marchesini

*Centro de Innovación Tecnológica Empresarial y Social S.A.,
Avda. M. Belgrano 758, 2322 Sunchales, Santa Fe, Argentina
Email: gmarchesini@cites-gss.com*

Starting up from the surface will explore the experiences of a scientist turned entrepreneur who started a surface technology company. The most important features will be considered and how to overcome common bottlenecks as well as the opportunities for starting a technology based company in the “wild” Latin American start up ecosystem.

Comunicaciones Tipo Pósters

***Propiedades cristalográficas, electrónicas
y magnéticas de superficies***

CTP1.- Estudio ab-initio de los efectos superficiales estructurales en las propiedades electrónicas y magnéticas de películas delgadas de *Fe-Rh*

María J. Jiménez, Gabriela F. Cabeza

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), Avda. L.N. Alem 1253,
B8000CPB Bahía Blanca, Argentina
Instituto de Física del Sur (IFISUR), Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina
Email: gcabeza@uns.edu.ar

La aleación ordenada *Fe-Rh* (B2-tipo *CsCl*) experimenta una transición de fase de primer orden desde el estado antiferromagnético (AFM) hasta el estado ferromagnético (FM) a temperatura próxima a la ambiente, acompañada de un incremento del 1-2 % volumen. En la fase FM los momentos magnéticos del *Fe* y del *Rh* son, respectivamente 3.2 y 0.9 μB y en la fase AFM hay estructura de espines colineales con $\pm 3.3 \mu\text{B}$ para los átomos de *Fe*, mientras que los átomos de *Rh* no presentan momento magnético. Las propiedades magnéticas de esta aleación están determinadas primariamente por la estructura cristalina y el número de electrones externos de los átomos metálicos [1].

La aleación equiatómica *Fe-Rh* presenta propiedades interesantes para aplicaciones tecnológicas en espintrónica, como por ejemplo grabación magnética inducida por calor (HAMR) [2], por lo que es una candidata prometedora para la fabricación de memorias magnéticas. Existe amplia literatura sobre esta aleación y sobre la fabricación y caracterización de superficies soportadas y películas, sin embargo, existen pocos trabajos de cálculos de primeros principios de superficies *Fe-Rh*.

El objetivo de este trabajo es estudiar mediante cálculos ab-initio, empleando el código VASP [3], las superficies *Fe-Rh* crecidas en los diferentes planos cristalográficos: (100), (110) y (111) tanto en la fase FM como en la fase AFM. Se analiza la influencia de los cambios estructurales en las propiedades electrónicas y magnéticas de las películas, así como su estabilidad.

[1] S. Maat, J.U. Thiele, E.E. Fullerton, *Physical Review B* 72 (2005) 214432.

[2] C. Baldasseroni, C. Bordel, C. Antonakos, A. Scholl, K.H. Stone, J.B. Kortright, F. Hellman, *Journal of Physics: Condensed Matter* 27 (2015) 256001.

[3] G. Kresse, J. Hafner, *Physical Review B* 47 (1993) 558R-561R.

CTP2.- Estudio de propiedades eléctricas de películas de polímeros de coordinación (*MOF*'s) con aplicación a memorias resistivas

**Victoria A. Gómez-Andrade, Fernando Gómez-Marlasca,
Pablo Levy, Federico Roncaroli**

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Centro Atómico Constituyentes,
Colectora Gral. Paz 1499, Buenos Aires, Argentina
Email: gandrade@tandar.cnea.gov.ar*

Los polímeros de coordinación (*MOF*) son materiales porosos, cristalinos, contruidos por centros metálicos y ligandos orgánicos, y se han utilizado ampliamente para catálisis[1], almacenamiento y separación de gases, “*drug-delivery*”, *etc.* [2]. Cada vez llaman más la atención por sus posibles aplicaciones en la industria electrónica, debido a la diversidad de compuestos que pueden conformar, y la capacidad de variar ampliamente la estructura electrónica [3].

Entre los candidatos a convertirse en la próxima generación de memorias no volátiles se encuentran los dispositivos que presentan Conmutación Resistiva (RS). En efecto, este tipo de memorias, que reciben el nombre de ReRAM, presentan características muy prometedoras tanto en desempeño como en integrabilidad con las tecnologías actuales de fabricación microelectrónica [4].

La característica fundamental de un dispositivo ReRAM es la modulación reversible -pero no volátil- del valor de su resistencia eléctrica, mediante la aplicación de estímulos eléctricos [5].

En este trabajo se muestra la construcción y aplicación de polímeros de coordinación (*MOF*'s) como dispositivos electrónicos ReRAM. Se sintetizaron películas de *ZIF-8*, *ZIF-67*, *ZIF-L-Zn* y *ZIF-L-Co* (Zeolitic Imidazole Framework, $[Zn(2\text{-Metilimidazol})_2]_n$, $[Co(2\text{-Metilimidazol})_2]_n$) sobre sustratos de zinc.

Las películas de *MOF*'s se caracterizaron por difracción de rayos-X con incidencia rasante para determinar la estructura cristalina de la película sintetizada, y por microscopia de fuerza atómica (AFM) modo contacto, para observar la morfología, dominios cristalinos y espesor de la película.

Para evaluar el comportamiento de las películas como memoria resistiva no volátil se construyeron dispositivos *Zn/MOF/Ag*.

Aplicando pulsos de corriente se estableció que la muestra presenta RS bipolar [6]. Por un lado, se observa histéresis con cruce por cero en las curvas I-V (que es una respuesta asociable al comportamiento bipolar). Por otro, se observa conmutación entre estados de resistencia altos y bajos cuando se somete a la muestra a pulsos con polaridades alternadas. También se evidencia la estabilidad del dispositivo al interrumpir la secuencia de pulsos y retomarla en cada uno de los estados de resistencia.

[1] G. Lu, Sh. Li, Z. Guo, O.K. Farha, B.G. Hauser, X. Qi *et al.*, *Nature Chemistry* 4 (2012) 310-316.

[2] G. Frey, *Chemical Society Reviews* 37 (2008) 191-214.

[3] A. Stroppa, P. Jain, P. Barone, M. Marsman, J.M. Pérez-Mato, A.K. Cheetham, H.W. Kroto, S. Picozzi, *Angewandte Chemie International Edition* 50 (2011) 5847-5850; *Angewandte Chemie* 123 (2011) 5969-5972.

[4] D.S. Jeong, R. Thomas, R.S. Katiyar, J.F. Scott, H. Kohlstedt, A. Petraru, C.S. Hwang, *Reports on Progress in Physics* 75 (2012) 076502.

[5] R. Waser, R. Dittmann, G. Staikov, K. Szot, *Advanced Materials* 21 (2009) 2632-2663.

[6] A. Sawa, *Materials Today* 11 (2008) 28-36.

CTP3.- Time-reversal symmetry protected by chemical disorder in the surface of topological insulators

María C. Martínez-Velarte,^{1,2,3} Bernhard Kretz,⁴ María Moro-Lagares,^{1,2} Trevor M. Riedemann,⁵ Thomas A. Lograsso,^{5,6} Luis Morellón,^{1,2,3} Manuel R. Ibarra,^{1,2,3} Arán García-Lekue,^{4,7} Myriam H. Aguirre,^{1,2,3} David Serrate^{1,2,3}

1.- Instituto de Nanociencia de Aragón (INA) & Laboratorio de Microscopías Avanzadas (LMA), University of Zaragoza, 50018 Zaragoza, Spain

2.- Department of Condensed Matter Physics, University of Zaragoza, 50009, Zaragoza, Spain

3.- Fundación Instituto de Nanociencia de Aragón (FINA), 50018 Zaragoza, Spain

4.- Donostia International Physics Center (DIPC), E-20018 San Sebastián, Spain

5.- Ames Laboratory, U.S. Department of Energy, IA 50011 Ames, USA

6.- Department of Materials Sciences & Engineering, Iowa State University, IA 50011 Ames, USA

7.- IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, E- 48011 Bilbao, Spain

Email: maguirre@unizar.es

The surface states of 3D topological insulators consist of Dirac fermions with helical spin structure in the reciprocal space [1], giving rise to spin-polarized and dissipation-less charge currents. This is robust against contamination, structural defects or phonons, but not against perturbations that break the time-reversal symmetry, as is the case of magnetic materials deposited on the surface -even at the level of single atoms-. Here we show that the surface chemical inhomogeneity of ternary compounds, such as Bi_2Se_2Te , preserves the topological spin texture in the presence of magnetic moments [2]. This is concluded from the absence of elastic backscattering events mediated by *Co* adatoms in quasi-particle interference patterns obtained by scanning tunneling spectroscopy. The mechanism responsible for the protection is investigated by energy resolved spectroscopy and ab-initio calculations, and can be ascribed to the distorted adsorption geometry of localized magnetic moments due to *Se-Te* disorder, which suppresses the hybridization with the surface states. These results make feasible the design of topological magnetoelectronic devices. Low temperature STM and STS are used to study the effect of individual magnetic moments on the surface states of 3D *Bi*-based topological insulators: Bi_2Te_3 and Bi_2Se_2Te . The spin texture of the Dirac cone is examined by the quasiparticle interference (QPI) patterns. The effect in the spin texture after *Co* doping the surface and by the application of a magnetic field will provide information about the preservation of time-reversal symmetry and hence about the preservation of non-trivial topological order. The chemical and structural sample properties will be studied by Aberration Corrected Transmission Electron Microscopy. Finally, we give a plausible interpretation of our results based on the hybridization between *Co* adatoms and topological surface states, and associate this hybridization with the adsorption sites of *Co* atoms on the topological insulators surface.

[1] H. Zhang, Ch.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Zh. Fang, Sh.-Ch. Zhang, *Nature Physics* 5 (2009) 438-442.

[2] T. Zhang, P. Cheng, X. Chen, J.-F. Jia, X. Ma, K. He, L. Wang, H. Zhang, X. Dai, Zh. Fang, X. Xie, Q.-K. Xue, *Physical Review Letters* 103 (2009) 266803.

CTP4.- Efectos magnetoelásticos en nanohilos de níquel embebidos en películas delgadas de alúmina porosa autoorganizada, evidencias de FMR

Luisina Forzani,¹ Carlos Ramos,² Ana M. Gennaro,^{1,3}
Roberto R. Koropecski,^{1,4} Ettore Vasallo-Brigneti²

1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Laboratorio de Resonancias Magnéticas, Centro Atómico Bariloche, Gerencia de Física, CNEA,
Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n, R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

3.- Departamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral,
C.C. 217, Ruta Nacional N° 168, Km 472.4, Paraje El Pozo, S3000ADQ Santa Fe, Argentina

4.- Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral,
Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: luisina.forzani@santafe-conicet.gov.ar

En este trabajo se utilizó la técnica de Resonancia Ferromagnética para medir la anisotropía magnética en función de la temperatura de nanohilos de níquel crecidos mediante electrodeposición pulsada en los nanoporos auto-organizados de una matriz de alúmina anódica porosa autosostenida (AAP). Se observó una disminución de la anisotropía magnética de aproximadamente un 20 % al disminuir la temperatura desde 298 hasta 120 K. Esta disminución es consistente con importantes efectos magnetoelásticos con la matriz de alúmina. Además estos resultados indicarían que la expansión térmica de la AAP es muy inferior a la expansión térmica de la AAP reportada por Zhang *et al.* [1].

[1] R.X. Zhang, T.S. Fisher, A. Raman, T.D. Sands, *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering* 13 (2009) 243-252.

CTP5.- Efecto de los ciclos de recocido y aplastado de sustratos de aluminio para la obtención de alúmina porosa nanoestructurada

Luisa Cenchá,¹ Luisina Forzani,¹ Claudia Antonio-Hernández,²
Raúl Urteaga,^{1,3} Roberto R. Koropecski^{1,4}

1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

3.- Facultad de Ingeniería y Ciencias Hidricas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina

4.- Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: luisina.forzani@santafe-conicet.gov.ar

La alúmina porosa nanoestructurada puede obtenerse en forma de membrana mediante un anodizado electroquímico de sustratos de aluminio de alta pureza, produciendo un arreglo ordenado de poros. Estas estructuras se utilizan frecuentemente para formar cristales fotónicos de respuesta óptica programada. En estos casos es clave controlar con precisión el espesor óptico de la capa fabricada. Este espesor depende ligeramente de la orientación cristalina de los diferentes granos del sustrato utilizado produciendo una dispersión de espesores cercana al 5 %, limitando la resolución con que puede diseñarse la respuesta óptica del sistema. En este trabajo se estudió el efecto sobre la distribución superficial de espesores ópticos en membranas de alúmina porosa, con diferentes procesos mecánicos y térmicos realizados sobre el sustrato de aluminio antes del anodizado. Se realizaron ciclos de recocido térmico y deformación por prensado explorando diferentes conjuntos de parámetros para producir un aumento del tamaño de los granos en el sustrato. Se realizó un mapeo de la respuesta óptica de las muestras y se compararon con análisis metalográficos por revelado químico. Se encontró que el tamaño de grano crece a medida que aumenta el número de ciclos de tratamiento térmico y mecánico obteniéndose granos de 1.2 mm^2 . Dentro de los granos individuales el espesor óptico de la membrana presenta variaciones menores al 0.3 %.

CTP6.- Propiedades magnéticas de grafito con vacancias

Benjamín Montenegro, Ricardo Faccio, Álvaro Mombrú

Centro NanoMat, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
Email: montenegro@fq.edu.uy

El grafito con defectos ha mostrado propiedades electrónicas muy interesantes, como el ferromagnetismo desarrollado por medio de los estados σ y π del sistema carbonoso. En este trabajo se presenta el efecto de la interacción entre vacancias de carbono alineadas a lo largo del eje c del grafito, discutiendo el efecto de la dilución del contenido de vacancias. En especial, se puso especial cuidado en la determinación de las propiedades estructurales más relevantes, por ejemplo incluyendo fuerzas de dispersión por medio de interacciones de van der Waals. Esto permite corregir con un buen nivel de precisión las distancias entre laminas de grafeno, las que son fundamentales para definir la interacción a lo largo de la dirección [001] del cristal de grafito.

Los cálculos se realizaron con el código VASP [1] (“Vienna Ab-Initio Simulation Package”), utilizando el funcional GGA (“Generalized Gradient Approximations”) [2,3] con la parametrización PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [2,3]. Se verificó la convergencia en energía de corte en puntos K. Las estructuras se optimizaron hasta que las fuerzas fueron menores a 0.01 eV/Å y los esfuerzos residuales menores a 0.1 kbar. Se compararon el efecto de los distintos funcionales de correlación e intercambio (PBE, revPBE [4-6], DF2 [7], opt86 y opt88 [8]) sobre la estructura. Finalmente, se procedió a calcular la densidad de estados y comparar el momento magnético total para los sistemas con distinta densidad de vacancias. Se observó una variación del momento magnético tanto a nivel de la concentración de vacancias como con la variación de los funcionales evaluados. En especial se encontró variaciones al modificar el eje c . Se encontró que la tendencia era a aumentar para el eje c y a aumentar para el momento magnético. Por tanto se demuestra la necesidad de utilizar funcionales que describan mejor las fuerzas de dispersión para este tipo de sistemas.

- [1] G. Kresse, D. Joubert, *Physical Review B* 59 (1999) 1758-1775.
- [2] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Physical Review Letters* 77 (1996) 3865-3868.
- [3] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Physical Review Letters* 78 (1997) 1396.
- [4] M. Dion, H. Rydberg, E. Schröder, D.C. Langreth, B.I. Lundqvist, *Physical Review Letters* 92 (2004) 246401.
- [5] G. Román-Pérez, J.M. Soler, *Physical Review Letters* 103 (2009) 96102.
- [6] J. Klimeš, D.R. Bowler, A. Michaelides, *Physical Review B* 83 (2011) 195131.
- [7] K. Lee, E.D. Murray, L. Kong, B.I. Lundqvist, D.C. Langreth, *Physical Review B* 82 (2010) 81101(R).
- [8] J. Klimeš, D.R. Bowler, A. Michaelides, *Journal of Physics C: Condensed Matter* 22 (2010) 074203.

CTP7.- Nanopartículas de Fe sobre pirita: generación y caracterización

**Adriana E. Candia,¹ Fernando Pomiro,¹ Silvia S. Montoro,¹
Mario C.G. Passegi (h),^{1,2} Julio Ferrón,^{1,2} Gustavo Ruano¹**

1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral,

Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: adriana.candia@ifis.santafe-conicet.gov.ar

La pirita (FeS_2) es un mineral natural abundante, con estructura cristalina cúbica (grupo espacial Pa3), diamagnético y semiconductor en su forma nativa. Al tratarse de un material de bajo costo, es la materia prima en la producción industrial de hierro y ácido sulfúrico. Actualmente, debido a sus potenciales aplicaciones, es objeto de estudio en ciencia básica en un amplio espectro de temas que van desde la bioquímica primordial [1] hasta el desarrollo de semiconductores a escala nanométrica [2]. Nuestro estudio apunta a la generación de pequeños dominios magnéticos (de dimensiones nanoscópicas) de Fe^0 en pirita a partir de la reducción del Fe^{2+} constituyente del mineral mediante el bombardeo con iones He^+ . Para ello, se ha realizado un exhaustivo estudio de dicho proceso, generando y caracterizando tales nanopartículas (NP's). En este trabajo presentamos resultados de la formación de NP's de Fe^0 sobre pirita en ultra alto vacío (UHV), a partir del bombardeo con iones He^+ de 1.0 a 4.5 keV de energía cinética. El estudio fue realizado abordando las siguientes técnicas: microscopia (STM) y espectroscopia túnel de barrido (STS), y espectroscopia de electrones Auger (AES) trabajando en condiciones de ultra alto vacío, y microscopias de fuerza atómica (AFM) y magnética (MFM) al aire. Luego de irradiar una muestra limpia de pirita natural con iones de He^+ de 1.0 keV de energía cinética, el estudio mediante STM permitió observar la formación de NP's granulares de aproximadamente 10 nm. Si bien esta técnica no es capaz de proveer información química de la superficie, es posible (a partir de STS) evaluar el carácter semiconductor o metálico de la muestra realizando curvas I-V. Estos experimentos mostraron que el carácter semiconductor ($E_{Gap} = 0.8$ eV) original de la muestra transiciona a partir de la irradiación de la misma, observándose un carácter metálico de la superficie granulada. En las imágenes AFM de topografía en aire se observaron NP's granulares de tamaños algo mayores que las observadas por STM en UHV. A su vez, se observó contraste magnético en los experimentos de MFM, lo que indica que las nanopartículas de Fe^0 generadas en UHV al exponerlas al aire se oxidan a magnetita (Fe_3O_4), el único óxido de hierro magnético a temperatura ambiente. Además, se estudió la difusión de oxígeno dentro de la estructura, previamente bombardeada con iones He^+ a los diferentes valores de energía cinética ya mencionados, a través de perfiles de profundidad con AES, siguiendo la forma de la línea de las señales del $Fe_{M2,3VV}$ y O_{KLL} .

[1] M.J. Russell, A.J. Hall, A.P. Gize, *Nature* 344 (1990) 387.

[2] L. Ding, X. Fan, X. Sun, J. Dua, Z. Liva, C. Tao, *RSC Advances* 3 (2013) 4539-4543.

CTP8.- Enlace químico en complejos de Kubas de hidrógeno-platino en grafeno defectuoso**Sebastián Píriz,¹ Ignacio López-Corral,² Ricardo Faccio,¹ Alfredo Juan²***1.- Centro NanoMat, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay**2.- Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina**Email: spiriz@fq.edu.uy*

Las nanoestructuras carbonosas decoradas con metales de transición son sistemas muy interesantes para el almacenamiento de hidrógeno a temperatura ambiente. La mejora en la capacidad se ha atribuido a diferentes mecanismos como: adsorción física, formación de hidruros, “spillover” y enlace de Kubas. Recientemente, estudios de STEM mostraron que la formación de enlaces tipo Kubas [1] pueden ocurrir en paralelo a otro tipo de mecanismos. Por otra parte, su contribución a la carga de hidrógeno puede ser superior a la reportada por otro tipo de mecanismos.

En este trabajo presentamos resultados de Teoría de la Funcional Densidad (DFT) para estudiar diferentes geometrías de PtH_2 decorando grafeno pristino y grafeno con vacancias. Se realizaron cálculos usando el funcional GGA-PBE [2] incluyendo Van der Waals [3] tanto con el código VASP [4] como con el código SIESTA [5]. El grafeno fue modelado considerando una celda hexagonal 5×5 con $10 \text{ \AA}$ de vacío en la dirección perpendicular al plano del grafeno.

Encontramos en la mayoría de los casos que el complejo tipo Kubas es el más estable junto con otros tipos de hidruros, en especial mostrando un enlace $H-H$ de $0.83 \text{ \AA}$. De todas formas en grafeno pristino el complejo Kubas no es estable tal como se ha informado en la bibliografía [5]. Consideramos varias configuraciones iniciales para el complejo de Kubas sobre grafeno con vacancias, encontrando sistemáticamente una donde la molécula de H_2 se ubica de forma casi perpendicular al enlace $C-Pt$. El estudio de hibridación, mediante la obtención de orbitales moleculares, permiten ver que la molécula de H_2 interactúa, además de con el Pt , con los estados $\pi-C$. Así, se demuestra que el fuerte enlace Pt -grafeno reduce la reactividad del centro metálico y al mismo tiempo el grafeno provee de estados de carga capaces de mejorar la interacción H_2 -grafeno mediante la formación de un complejo del tipo Kubas. Acorde a estos resultados la monovacancias en grafeno pasivan a los átomos de Pt individuales y por tanto mejoran sus aptitudes para el propósito del almacenamiento de hidrógeno.

[1] C.I. Contescu, K. Van Benthem, S. Li, C.S. Bonifacio *et al.*, *Carbon* 49 (2011) 4050-4058.

[2] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Physical Review Letters* 77 (1996) 3865-3868.

[3] M. Dion, H. Rydberg, E. Schröder, D.C. Langreth, B.I. Lundqvist, *Physical Review Letters* 92 (2004) 246401.

[4] G. Kresse, J. Furthmüller, *Computational Material Sciences* 6 (1996) 15-50.

[5] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* 14 (2002) 2745-2779.

[6] Y. Park, G. Kim, Y.H. Lee, *Applied Physics Letters* 92 (2008) 083108.

CTP9.- Caracterización de películas delgadas de $Fe-Ga$ utilizando RBS y perfilado en profundidad mediante decapado iónico y XPS

**Luis M. Rodríguez,^{1,3} Gerardo A. Ramírez,^{2,3} Julio E. Gayone,^{1,3}
Daniel E. Fregenal,^{1,3} Guillermo C. Bernardi,¹ Julián Milano^{2,3}**

1.- Laboratorio de Colisiones Atómicas y Física de Superficies (CAB-CNEA),
Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n, R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

2.- Laboratorio de Resonancias Magnéticas (CAB-CNEA),
Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n, R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

3.- Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Email: lmr@cab.cnea.gov.ar

Entre los materiales magnéticos pueden destacarse las aleaciones con interacciones magnetoelásticas fuertes ya que son muy prometedoras para el diseño de nuevos dispositivos cuando dichas muestras son preparadas a escalas nanométricas. En estos casos sus propiedades magnéticas pueden modificarse mediante deformaciones elásticas [1,2]

Es en este ámbito en el que se hace imprescindible una correcta caracterización de las películas crecidas, tanto química como estructuralmente, para luego comprender su comportamiento magnético [3,4].

En este trabajo presentamos la caracterización de películas delgadas de $Fe_{1-x}Ga_x$ -material altamente magnetostrictivo- sobre sustratos de Si , fabricados mediante la técnica de deposición por bombardeo iónico. La caracterización se realizó mediante Retrodispersión de Rutherford (RBS) y Espectroscopia de electrones fotoemitidos por rayos X (XPS) con decapado iónico.

Los resultados experimentales muestran que en el crecimiento de las películas se logra una composición química homogénea una vez que se va más allá de las capas superficiales, y que en la superficie propiamente dicha hay cambios muy grandes en la composición general debidos en parte a la contaminación pero principalmente a un efecto de envejecimiento de las películas.

En cuanto a las técnicas utilizadas, estas tienen una rica historia y mostramos aquí cómo se complementan ambas con gran acuerdo en su uso como herramientas en el área de los nuevos materiales. Más aún, se aprecia que no sólo es factible extender el espectro de aplicación de una técnica típica de superficies como lo es XPS mediante el decapado iónico sino que también, para elementos pesados, una técnica de volumen como RBS puede brindar cierta información en el área de la física de superficies.

[1] M. Eddrief, Y. Zheng, S. Hidki, B. Rache-Salles, J. Milano, V.H. Etgens, M. Marangolo, *Physical Review B* 84 (2011) 161410(R).

[2] M. Barturen, J. Milano, M. Vásquez-Mansilla, C. Helman, M.A. Barral, A.M. Llois, M. Eddrief, M. Marangolo, *Physical Review B* 92 (2015) 054418.

[3] S. Schnurr, U. Wiedwald, P. Ziemann, V.Y. Verchenko, A.V. Shevelkov, *Beilstein Journal of Nanotechnology* 4 (2013) 461-466.

[4] D. Iselt, U. Gaitzsch, S. Oswald, S. Fähler, L. Schultz, H. Schlörb, *Electrochimica Acta* 56 (2011) 5178-5183.

CTP10.- Influencia de la presión y campos externos en las propiedades dieléctricas de compositos *PVDF-BiFeO₃-NTC***Mariana D. Sosa,^{1,2} Leila M. Saleh-Medina,^{1,2} Martín Negri^{1,2}**

1.- DQIAyQF, FCEN-UBA, Argentina

2.- INQUIMAE, FCEN-UBA, Argentina

Email: lsmedina@qi.fcen.uba.ar

Objetivos: obtener compositos elastoméricos trifásicos (*PVDF-BiFeO₃-NTC*) para su aplicación en dispositivos flexibles y analizar la influencia de la presión mecánica y de campos eléctricos y magnéticos sobre las propiedades dieléctricas.

Introducción: el fluoruro de polivinilideno (*PVDF*) es un polímero cristalino que puede estar presente en distintas fases, siendo la denominada β la más interesante dado que presenta histéresis eléctrica. *BiFeO₃* pertenece al grupo de los materiales multiferroicos, es decir que presenta simultáneamente al menos dos fases de las conocidas como ferroicas (ferromagnéticas, ferroeléctricas, ferroelásticas incluyendo también sus versiones anti-). La presencia de más de uno de estos órdenes puede llevar al acoplamiento cruzado de propiedades. Por ejemplo, en compuestos simultáneamente ferroeléctricos y ferromagnéticos puede observarse la presencia del efecto magneto-eléctrico (modificación de propiedades dieléctricas por aplicación de campos magnéticos). Por su parte los nanotubos de carbono (*NTC*) son conocidos por su buena conductividad eléctrica. La incorporación de materiales multiferroicos [1] y/o conductores [2] permiten obtener materiales con altos valores de constante dieléctrica (ϵ). Sin embargo, si el material conductor se encuentra en una proporción mayor una fracción crítica se generan pérdidas por conducción. Además, si el material es multiferroico, la presencia de campos magnéticos puede modificar ϵ .

Metodología: se incorporan *BiFeO₃* y *NTC* a una solución de *PVDF* y $Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ en dimetilformamida. La suspensión se deposita por “*spin-coating*” en sustratos de aluminio. Se deja evaporar el solvente a diferentes temperaturas para evaluar su efecto sobre la formación de la fase β . Las películas se caracterizaron por SEM, perfilometría, DSC y FTIR. Se realizaron análisis de impedancia y se midieron las curvas de polarización dieléctrica a diferentes presiones externas.

Resultados: por “*spin-coating*” se obtienen películas delgadas de unos 30 μm de espesor. Todas las medidas de propiedades dieléctricas se referencian a las mediciones iniciales donde se ejerce una presión de 0.5 bar, para asegurar buen contacto. Se observa un aumento en los valores de polarización al medir las curvas a mayores presiones. Este efecto resulta reversible en el rango de presiones 0.5-50.0 bar.

Por otro lado, las películas preparadas fueron sometidas a diferentes campos eléctricos durante distintos tiempos. Si se aplican campos eléctricos o presiones muy altos, las corrientes de fuga aumentan, dando lugar a curvas de polarización deformadas. Al incorporar al menos 0.5 % m/m de *NTC* respecto a *PVDF*, las corrientes de fuga aumentan de manera considerable.

Conclusiones parciales: lograron obtenerse películas elastoméricas con interesantes propiedades dieléctricas. Estas propiedades pueden ser modificadas por la aplicación de presiones en el rango 0.5-50.0 bar. El efecto es reversible, con lo que se vuelven potenciales materiales para desarrollar sensores de presión.

[1] L.M. Saleh-Medina, G.A. Jorge, D. Rubi, N. D’Accorso, R.M. Negri, *Journal of Physical. Chemistry C* 119 (2015) 23319-23328.

[2] B. Fan, J. Bai, *Journal of Physics D: Applied Physics* 48 (2015) 455303.

CTP11.- Recubrimiento nanoestructurado de CuO_x modificado con nanopartículas de CeO_2 para uso en catálisis

**Claudia A. Neyertz, Ana P. Cabello, Maximiliano Clavero,
María A. Ulla, Juan M. Zamaro**

*Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE-CONICET), Facultad de Ingeniería Química,
Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: apcabello@fiq.unl.edu.ar*

Los óxidos de cobre presentan actividad catalítica en numerosas reacciones de oxidación y en los últimos años se ha centrado la atención en el estudio de catalizadores basados en estas fases, debido a su menor costo respecto a otras formulaciones catalíticas basadas en metales nobles. Por esta razón, es de sumo interés sintetizar películas con nanoestructuras de CuO_x en sustratos que puedan ser dedicados a estas aplicaciones [1,2]. En varios trabajos recientes se ha reportado el crecimiento de nanoagujas de CuO_x en sustratos de cobre con diferentes geometrías como mallas y alambres, por calentamiento directo en aire [3-5]. En este contexto, el objetivo del presente trabajo es sintetizar películas nanoestructuradas de CuO_x sobre láminas de cobre microplegadas y luego modificarlas con CeO_2 a modo de promotor. Posteriormente estos sistemas se ensayarán en un microrreactor en reacciones de oxidación catalítica.

Se sintetizaron nanoestructuras de CuO_x en láminas de cobre con microcanales mediante tratamientos térmicos en mufla (2 °C/minuto, 500 °C/8 horas). Posteriormente se dispersaron en éstas nanopartículas de CeO_2 mediante inmersiones controladas en suspensiones de ceria comercial. Por XRD y SEM se determinó, respectivamente, que las muestras obtenidas presentaron un desarrollo de óxidos de cobre en forma de nanoagujas (largo 11 μm , espesor 330 nm) que cubrieron uniforme y densamente los laterales y fondo de los microcanales. Esta disposición superficial haría posible dispersar en ellas nanopartículas de CeO_2 . Luego de la impregnación de estas muestras con suspensiones de ceria, se obtuvo un incremento de masa debido al anclaje de las nanopartículas en las estructuras de CuO_x . Mediante TGA en N_2 o aire se determinó que la temperatura óptima de eliminación total del estabilizante de las nanopartículas en aire es de unos 400 °C. Se observó un escalón de pérdida de masa alrededor de los 100 °C debido a la eliminación del agua adsorbida y otro alrededor de los 250 °C, relacionado con la descomposición (N_2) o combustión (aire) del acetato. Por SDTA en simultáneo, se observó un comportamiento endotérmico alrededor de los 100 °C y uno exotérmico alrededor de los 250 °C, en correspondencia con los procesos descriptos.

- [1] N. Pérez, E. Miró, J. Zamaro, *Catalysis Today* 213 (2013) 183-191.
- [2] L. Kiwi-Minsker, A. Renken, *Catalysis Today* 110 (2005) 2-14.
- [3] C. Neyertz, A. Gallo, M. Ulla, J. Zamaro, *Surface & Coatings Technology* 285 (2016) 262-269.
- [4] X. Jiang, T. Herricks, Y. Xia, *Nano Letters* 2 (2002) 1334-1338.
- [5] J. Liang, N. Kishi, T. Soga, T. Jimbo, *Applied Surface Science* 257 (2010) 62-66.

CTP12.- Capacitores flexibles de películas polímeros-partículas

Eithan Hochman,^{1,2} Solange E. Luque,¹ Matías A. Aguirre,¹ José L. Mietta,¹
Leila M. Saleh-Medina,^{1,2} Mirta Fascio,^{3,4} Norma D'Accorso,^{3,4} Martín Negri^{1,2}

1.- Instituto de Química Física de Materiales, Ambiente y Energía (INQUIMAE, CONICET-UBA),
Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

2.- Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física. Facultad de Ciencias Exactas y
Naturales, UBA, Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

4.- Centro de Investigación en Hidratos de Carbono (CIHIDECAR, CONICET-UBA),
Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

5.- Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA,
Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

Email: rmn@qi.fcen.uba.ar

Se prepararon capacitores donde la película dieléctrica es un compuesto elástico formado por dispersiones de partículas ferroeléctricas en un polímero elastomérico. Como partículas se emplearon titanato de bario ($BaTiO_3$) y de estroncio ($SrBaTiO_3$). Como matriz elástica se utilizaron tres tipos de polímeros: goma de caucho sintético (*SBR*, por sus siglas en inglés), polidimetilsiloxano (*PDMS*) y difluoruro de polivinidileno (*PVDF*). Estos sistemas son de interés por sus aplicaciones en electrónica flexible.

Las películas de *SBR* y *PVDF* se prepararon mediante “*spin-coating*”. Para ello se disolvieron el polímero y las partículas ferroeléctricas en un solvente volátil (tolueno y dimetilformamida, respectivamente), dejando evaporar parcialmente el solvente bajo agitación permanente, hasta alcanzar la viscosidad apropiada para realizar “*spin-coating*” sobre un dado sustrato conductor (aluminio o bien otro compuesto elastomérico). Los composites en *PDMS* se prepararon en forma similar, pero agregando un agente entrecruzante al principio de la preparación y realizando el curado térmico (100 °C) una vez obtenidas las películas.

Las películas presentan espesores del orden de 10-50 μm , determinados por perfilometría de barrido. La respuesta en frecuencia se determinó mediante espectroscopia de impedancia, hasta 1 MHz. La respuesta ferroeléctrica se investigó mediante la determinación de curvas de polarización dieléctrica en función de campo eléctrico utilizando un analizador LC.

Para los sistemas en *PDMS* la respuesta en frecuencia de la impedancia se puede ajustar bien por un modelo RC, con resistencias entre 10-100 M Ω y capacitancias del orden de pF. Las constantes dieléctricas estáticas dependen de la proporción y naturaleza de material inorgánico incorporado.

En el caso de los sistemas en *PVDF*, la respuesta dieléctrica es más compleja, pues *PVDF* es un polímero ferroeléctrico. El ajuste de los datos de impedancia en función de la frecuencia requirió utilizar modelos circuitales conteniendo elementos de fase constante (CPE). Por otra parte, las curvas de polarización dieléctrica se obtuvieron con mucha mejor relación señal-ruido, dado el carácter ferroeléctrico de la matriz.

Para los composites en *SBR* se pudieron implementar contactos elásticos basados en películas de dispersiones de nanotubos de carbono (*MWCN*) en el respectivo elastómero, de manera de formar capas conductor-dieléctrico-conductor. Se logró una adherencia muy buena entre capas sin cortocircuito entre láminas. De esta forma se obtuvieron sistemas totalmente flexibles, en donde no solo el dieléctrico es elastomérico, si no también los contactos.

CTP13.- Estudio de efectos optoelectrónicos sobre películas electrodepositadas de derivados de fluoreno fluorados con grupos carbozoles electropolimerizables

Laura Hernández,¹ María V. Cappellari,¹ Luciana Fernández,¹ Fernando Fungo,¹ Luis Otero,¹ Miguel Gervaldó,¹ Gianluca Pozzi²

1.- Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto, X5804BYA Río Cuarto, Argentina

2.- Institute of Molecular Science and Technologies, National Research Council (CNR-ISTM)

c/o Department of Chemistry, University of Milan via Golgi 19, 20133 Milan, Italy

Email: lhernandez@exa.unrc.edu.ar

Introducción: la optoelectrónica es un área de estudio que ha tenido gran auge en los últimos años. Dentro de esta rama podemos encontrar materiales electrocromáticos; capaces de cambiar sus propiedades ópticas cuando su estado redox es modificado y de esta manera modular la intensidad y distribución espectral de la luz que los atraviesa [1]. Los polímeros conductores constituyen una interesante clase de materiales con innumerables aplicaciones en el campo de la optoelectrónica [2,3]. Una técnica prometedora de producción de películas de polímeros conductores, es la electropolimerización de monómeros electroactivos [4,5], que permite la síntesis del polímero con un control preciso sobre el espesor de la película en tan solo un paso [3].

En este marco, el objetivo de este trabajo es la síntesis, estudio y desarrollo de nuevos materiales electropolimerizables con capacidad de producir películas finas con propiedades electrocromáticas. Se exhibirán estudios sobre una serie de moléculas con centro fluoreno con dos unidades carbazol con capacidad de electropolimerizar.

Resultados: Se pudo observar que la molécula *IP1* (9,9' di-bisalquilfluoreno-2,7 dicarbazol con sustituyentes flúor en gran parte de la cadena alquílica) presenta un proceso de oxidación reversible típico del grupo carbazol. Adicionalmente, se logró obtener una película homogénea sobre un electrodo de indio dopado con óxido de estaño (*ITO*) cuando se realizaron sucesivas voltametría cíclicas de una solución del monómero de *IP1*. La película obtenida mostró un proceso de oxidación reversible, acompañado de un claro y homogéneo cambio de color.

Adicionalmente, se estudió el comportamiento de los espectros de absorción de películas de *IP* en función del potencial aplicado; la forma neutra de la película de *IP1* es transparente en la región visible del espectro electromagnético, mientras que, a potenciales más anódicos, se observa la aparición de una banda a 450 nm de coloración amarilla y otra a 800 nm de coloración verde. Bajo las mismas condiciones, se realizaron las mismas experiencias para una molécula análoga pero sin sustituyentes fluorados en las ramificaciones. En dichas experiencias se observó que la presencia del flúor en *IP1* favorecería la electrodeposición del monómero.

Conclusiones: las experiencias realizadas mostraron que la presencia del flúor en *IP1* genera un efecto que favorece la electrodeposición del monómero. Adicionalmente, las películas electrogeneradas presentaron diferentes coloraciones dependiendo del potencial aplicado, demostrando así su aplicación en dispositivos electrocromáticos.

[1] P.M.S. Monk, R.J. Mortimer, D.R. Rosseinsky, *Electrochromism: Fundamentals and Applications*. VCH Publisher Inc., New York, USA, 1995

[2] J. Shinar, *Organic Light-Emitting Devices: A Survey*, Springer; 1st.Edition, New York, USA, 2003.

[3] Y. Ma, Sh. Tang, F. Shen *et al.*, *The Journal of Physical Chemistry B* 110 (2006) 17784-17789.

[4] J. Roncalli, *Chemical Review*. 92 (1992) 711-738.

[5] J.L. Segura, R. Gómez, R. Blanco, Egon Reinold, P. Bäuerle, *Chemistry of Materials*. 18 (2006) 2834-2847.

CTP14.- Influencia de la metodología de síntesis de perovskitas en la generación de estados de separación de cargas fotoinducidas mediante medidas de fotovoltaje superficial

**Lorena Macor,¹ M. Belén Suárez,¹ Claudia Solís,¹ Luis Otero,¹
Miguel Gervaldo,¹ Thomas Dittrich,² Jörg Rappich²**

1.- Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto,
X5804BYA Río Cuarto, Argentina

2.- Helmholtz Center Berlin for Materials and Energy, Institute of Silicon Photovoltaics,
Kekuléstr. 5, D-12489 Berlin, Germany
Email: lmacor@exa.unrc.edu.ar

Las celdas solares basadas en perovskitas han revolucionado la tecnología fotovoltaica por diferentes motivos, destacando la elevada eficiencia de fotoconversión alcanzada (22.1 %), y su fácil preparación mediante procesos a bajas temperaturas y bajo costo de producción, como así también la diversidad sintética de las perovskitas utilizadas y sus características optoelectrónicas [1]. Si bien en la literatura existen numerosos reportes de diferentes arquitecturas de celdas, en todos los casos se emplea como material fotoactivo halogenuros organometálicos, los cuales cuando cristalizan lo hacen en el sistema de la perovskita ABX_3 (donde A: catión orgánico, B: Pb, Cd, Cs, y X: Cl, Br y/o I). Independientemente de la configuración, la performance de la celda se encuentra fuertemente influenciada por la morfología de la película de perovskita, la cual depende tanto del método de deposición como así también de la composición del material empleado como precursor. Por ello diferentes estrategias de deposición han sido desarrolladas con el fin de mejorar los cristales obtenidos y consecuentemente el funcionamiento del dispositivo, como así también su estabilidad.

En este trabajo se realizó un estudio del efecto de los diferentes métodos de generación de los cristales de perovskita en la separación de cargas fotoinducida y en la longitud de difusión de los portadores de cargas mediante estudios de fotovoltaje superficial. Como sustrato se utilizó óxido de níquel compacto generado electroquímicamente sobre un vidrio conductor (FTO), sobre el cual se depositó el material electroactivo mediante el método secuencial donde primero se deposita una capa de PbI_2 y luego el sustrato se sumerge en una solución de yoduro de metilamonio con posterior tratamiento térmico. El PbI_2 fue depositado sobre los sustratos mediante tres técnicas, una que involucra el crecimiento electroquímico de PbI_2 [2], otra que consiste en el crecimiento electroquímico de PbO_2 [3], y la tercera que consta en la deposición de PbI_2 por “spin-coating” a partir de una solución. En todos los casos, la fórmula química de la perovskita resultante es $CH_3NH_3PbI_3$. Se logró preparar perovskitas de halogenuros organometálicos en condiciones ambientales, consiguiendo minimizar los efectos perjudiciales que produce la humedad. A partir de los resultados obtenidos de espectroscopia de fotovoltaje superficial se pudo observar que los electrones son separados hacia la superficie externa mientras que los huecos son inyectados en la capa compacta del óxido de níquel. Además, se pudo calcular la longitud de difusión de separación de cargas, encontrando que para las muestras de perovskitas generadas a partir del PbO_2 la longitud obtenida era del orden de los μm . Este resultado es muy prometedor, ya que las longitudes de separación de cargas obtenidas hasta el momento no superan los cientos de nanómetros.

[1] H.S. Jung, N.G. Park, *Small* 11 (2015) 10-25.

[2] J.C. Hill, J.A. Koza, J.A. Switzer, *ACS Applied Materials & Interfaces* 7 (2015) 26012-26016.

[3] J.A. Koza, J.C. Hill, A.C. Demster, J.A. Switzer, *Chemistry of Materials* 2016 (2016) 399-405.

CTP15.- Propiedades eléctricas y magnéticas de nanotubos de carbono sintetizados en matrices mesoporosas

**Maximiliano Merlo,¹ Federico Ribetto,² Julieta Carballo,² Henry Núñez,¹
Marcos Vozer-Felisberto,³ Noelia Bajales^{1,4}**

1.- Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FaMAF,UNC),
Medina Allende S/N, X5000HUA Córdoba, Argentina

2.- Grupo de Nanomateriales (NANOMAT), Departamento de Física (FCEFYN- UNRC),
Ruta Nacional 36, Km. 601, X5804BYA Río Cuarto, Córdoba, Argentina

3.- Universidad Federal de Minas Gerais (UFMG), Avda. Antônio Carlos 6.627, Campus Pampulha,
31270-901 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

4.- Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG, CONICET-UNC),
Medina Allende S/N, X5000HUA Córdoba, Argentina

Email: bajalesluna@famaf.unc.edu.ar

Los nanotubos de carbono (*NTC's*) son versátiles alótropos de carbono, con algunas decenas de nanómetros de diámetro, hasta algunos mm de longitud y constituidos por átomos de C unidos por enlaces tipo sp^2 . Estructuralmente, los *NTC's* están compuestos por láminas de grafeno enrolladas en forma de tubo. El grafeno es una estructura laminar plana, de tan solo un átomo de espesor, compuesta únicamente por átomos de carbono empaquetados en una estructura hexagonal tipo “panel de abeja”. Cuando una lámina única de grafeno se enrolla formando un cilindro da origen a un nanotubo de pared simple, mientras que varias láminas de grafeno enrolladas formando un arreglo concéntrico de cilindros dan lugar a un nanotubo de pared múltiple. Existen numerosos métodos de síntesis de *NTC's*, siendo la deposición química en fase vapor (CVD) una de las más eficientes para la producción a escala industrial. Sin embargo, independientemente del método de síntesis elegido, es fundamental el rol que cumplen las nanopartículas (*NP's*) catalíticas para producir *NTC's* de mejor calidad, pureza y mayor cantidad [1].

En este trabajo se propone un método de obtención de *NTC's* a partir de clústers de Ni, electrodepositados en membranas de alúmina porosa (*MAP's*), fabricadas mediante el anodizado en dos pasos de un sustrato de aluminio ultra puro [2]. Los *NTC's* sintetizados por medio de CVD en *MAP's* evidencian un alto ordenamiento, atribuido a su crecimiento en los canales de alúmina mesoporosa. La caracterización estructural de las matrices utilizadas, así como los *NTC's* obtenidos, se realiza mediante SEM. Mediciones de resistencia eléctrica en función de la temperatura en el rango de 10-290 K evidencian un cambio en la conductividad eléctrica, mientras que mediciones de resistencia en función de campo magnético indican que los *NTC's* sintetizados exhiben, a temperatura ambiente, un efecto de magnetorresistencia superior al 10 %.

[1] M. Felisberto, L. Sacco, I. Mondragon, G.H. Rubiolo, R.J. Candal, S. Goyanes, *Materials Letters* 64 (2010) 2188-2190.

[2] S. Viqueira, N. Bajales, S. Urreta, P. Bercoff, *Journal of Applied Physics* 117 (2015) 204302.

CTP16.- Estudio teórico de la emisión de electrones de alta energía en la dispersión de He^+ por una superficie de AlF_3 **Adalberto Iglesias-García, Edith C. Goldberg**

Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina
Email: adalberto.iglesias@ifis.santafe-conicet.gov.ar

Mediciones del espectro de emisión de electrones secundarios de superficies de fluoruro de aluminio impactadas por iones de gases nobles muestran una estructura no esperada de altas energías (> 15 eV), la cual se incrementa con el aumento de la energía cinética del ión dispersado. Hasta ahora la distribución de electrones que muestra éste espectro de emisión se ha explicado en forma muy cualitativa. G. Ruano *et al.* [1] propusieron que la estructura de altas energías en el espectro de emisión se debe a la auto-ionización de un estado excitado de dos electrones de F^- , poblado por la promoción de electrones en colisiones cercanas proyectil- F o colisiones $F-F$.

En éste trabajo se realiza un estudio teórico mecánico-cuántico, enmarcado en el modelo de Anderson, de la dispersión de He^+ por una superficie de AlF_3 . Presentamos resultados de la fracción de carga del proyectil y de la distribución de electrones después de ocurrida la colisión. Estas dos cantidades se calculan en función de la energía del ión incidente. Éste problema dependiente del tiempo se resuelve por medio de las funciones de Green-Keldysh y el método de la ecuación de movimiento [2].

Nuestros resultados nos permiten inferir que una posible fuente de los electrones energéticos en el espectro de emisión de electrones secundarios se debe a los electrones originados por la recombinación par electrón-hueco entre los electrones promovidos a la banda de conducción del AlF_3 y los huecos que quedaron en su banda de valencia después de la interacción con el proyectil.

[1] G. Ruano, R.A. Vidal, J. Ferrón, R.A. Baragiola, *Surface Science* 605 (2011) 1807-1811.

[2] A. Iglesias-García, E.A. García, E.C. Goldberg, *Physical Review B* 87 (2013) 075434.

***Adsorción de átomos y moléculas,
crecimiento de monocapas y estructuras
de baja dimensionalidad***

CTP17.- Generación de nanocompuestos de grafenos y nanofibras de plata para biosensado

**Facundo C. Herrera,¹ Lourdes Anduaga,¹ Juan M. Devida,¹
María A.C. Huergo,¹ Diego Pallarola,² Félix G. Requejo¹**

1.- Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CONICET y UNLP)

2.- Instituto de NanoSistemas (INS, UNSM)

Email: fherrera@inifta.unlp.edu.ar

La integración sinérgica de las propiedades fisicoquímicas excepcionales de películas de óxido de grafeno (*GO*) y nanofibras de plata (*NFAg*) representa una estrategia prometedora para mejorar el rendimiento electrocatalítico de los dispositivos de biosensado [1]. En este trabajo se describe la síntesis de electrodos constituidos por *GO* y *NFAg*, y su aplicación en la detección de glucosa. La optimización de los parámetros de síntesis se llevó a cabo a partir de la información obtenida de diversas técnicas de caracterización: microscopias (SEM), (TEM), (AFM), espectroscopias Raman y XPS, SAXS, y electroquímica. Los ensamblados de *GO* y *NFAg* se generaron mediante la técnica de Langmuir-Blodgett (L-B) sobre sustratos de óxido de indio-estaño (*ITO*). Se optimizaron las condiciones de deposición de las *NFAg*, su concentración, el tratamiento de reducción y dimensiones de los dominios cristalinos de *GO*, y la presión de transferencia desde la fase líquida al sustrato sólido. Mediante voltametría cíclica se evaluaron las propiedades de transferencia electrónica de los nanocompositos y su capacidad para transducir la oxidación de glucosa catalizada por la enzima glucosa oxidasa (*GOx*). La oxidación de glucosa fue satisfactoriamente detectada en un intervalo de concentraciones fisiológicas de glucemia. Se encontró que las *NFAg* mejoran las propiedades de conducción eléctrica de los ensamblados, siendo capaces de interconectar entre sí los dominios de *GO*, el cual además de proveer una plataforma eficiente para la conductividad de electrones y huecos electrónicos, facilita la interacción entre el electrodo y el analito que se desea detectar. Los resultados obtenidos confirman la sinergia de las propiedades del *GO* y las *NFAg*, tanto por la conductividad eléctrica y biocompatibilidad del material resultante, como por su capacidad para la inmovilización de enzimas. Estos aspectos son de fundamental relevancia para el desarrollo de dispositivos eficientes para biosensado.

[1] L. Xu, Y. Hou, M. Zhang, T. Cheng, W. Huang, Ch. Yao, Q. Wu, *Analytical Methods* 7 (2015) 5649-5653.

CTP18.- Diseño de autoensamblado de Di-carbonitrilo-polifenilo y Co sobre grafeno

Sindy J. Rodríguez,¹ Juan C. Moreno-López,² Eduardo A. Albanesi,^{1,3}
Stefano Gottardi,⁴ Meike Stöhr⁴

1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Yachay Tech University, School of Physical Sciences and Nanotechnology, Urcuquí, Ecuador

3.- Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Entre Ríos, Argentina

4.- Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, Nijenborgh 4,
9747 AG Groningen, The Netherlands

Email: sindy.rodriguez@santafe-conicet.gov.ar

El autoensamblaje de redes nanoporosas en superficies cristalinas es aceptado como uno de los métodos más promisorios para desarrollar futuros almacenadores moleculares de energía (por ejm. hidrógeno o metano). Más allá de dicha potencial aplicación, actualmente las moléculas orgánicas son comercialmente usadas en aplicaciones fotovoltaicas, dispositivos emisores de luz, y transistores de efectos campo, entre otros. En este trabajo estudiamos el autoensamblado molecular de Di-carbonitrilo-polifenilo ($NC-Ph_n-CN$, donde $n=3, 4, 5...$) y cobalto (Co) sobre grafeno, prestando particular atención en la influencia de las interacciones moléculas-sustrato. Por medio de una modelización computacional con el formalismo de la teoría de la densidad funcional, analizamos la formación de redes orgánicas bidimensionales de $NC-Ph_6-CN$, $NC-Ph_3-CN$ con Co en fase gaseosa. De las cinco posibles configuraciones moleculares que estudiamos, podemos explicar las que resultan sintetizables, en términos de sus energías totales, densidades de estado y de distribuciones de carga; obteniendo un excelente acuerdo con los resultados experimentales.

Las moléculas fueron sintetizadas por Leticia Monjas en el grupo de Anna K.H. Hirsch en el Stratingh Institute for Chemistry, University of Groningen, Nijenborgh 7, 9747 AG Groningen, The Netherlands.

CTP19.- Histogram Reweighting aplicado al cálculo del cumulante de Binder, temperatura crítica de condensación y diagrama de fase de un sistema de k-meros adsorbidos sobre redes cuadradas

Gonzalo J. dos Santos, Daniel H. Linares, Antonio J. Ramírez

Instituto de Física Aplicada (INFAP-UNSL), Avenida Ejército de los Andes 950, San Luis, Argentina
Email: gonzalodossantos@gmail.com

La técnica de repesado de histogramas o “*Histogram Reweighting Technique*” es un método que nos permite, conociendo la distribución de probabilidad de equilibrio en un punto del espacio de los parámetros, obtener la distribución de probabilidad en otro punto del espacio de los parámetros dentro de un entorno del punto original. La idea principal de esta técnica es extraer la mayor información posible de cada simulación. En el presente trabajo aplicamos esta técnica junto con simulaciones de Monte Carlo en el gran canónico a un sistema de k-meros interactuantes a primeros vecinos adsorbidos en superficies cuadradas. Los k-meros podrán adsorberse solo en una dirección (orden forzado) y la interacción adsorbato-adsorbente se considera nula. A partir de los histogramas y de la técnica mencionada anteriormente se obtienen las curvas del cumulante de Binder para determinar la temperatura crítica de condensación y mediante la misma técnica obtenemos los diagramas de fase. Calculamos primero la temperatura crítica para el caso de monómeros (solución exacta) para probar la validez del método y luego lo hacemos para diversos tamaños de k-meros. Finalmente, realizamos un análisis de errores y calculamos el resto de las variables termodinámicas de interés.

CTP20.- Estudio de las propiedades de adsorción de gases de interés medioambiental en materiales nanoporosos

Valeria Cornette, Victor Yelpe, Raúl López

Instituto de Física Aplicada (INFAP), CONICET-Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina
Email: valecorn@gmail.com

Los problemas energéticos y medio ambientales han creado la necesidad de diseñar nuevos materiales que pueden ser usados en formas más eficientes con alta selectividad. Los carbones nanoestructurados han atraído la atención debido a sus excelentes propiedades fisicoquímicas, las cuales son muy útiles en muchas aplicaciones, tales como: procesos de separación (CH_4/CO_2 y N_2/O_2), almacenamiento de gases (CH_4 y H_2), captura de gases (CO_2), almacenamiento de energía como electrodos en baterías y supercapacitores, *etc.*

Métodos de simulación como NLDFT, QSDFT y simulación de Monte Carlo en el formalismo Gran Canónico han sido originalmente desarrollados asumiendo geometrías simples para modelar el adsorbente (“*slit*” o rendija, cilíndrica, *etc.*). Sin embargo, la emergencia de nuevos materiales con morfologías de poros prediseñadas (obtenidas a partir de un molde o “*template*”) requieren el desarrollo de nuevos modelos, los cuales tengan en cuenta las características específicas de estas estructuras.

En este trabajo estudiamos la adsorción de diferentes tipos de gases en el carbón nanoestructurado CMK-3, modelando el adsorbente con geometrías simples para luego abordar el estudio mediante un modelo específico a través de simulación de Monte Carlo.

Los resultados obtenidos son comparados con las isothermas experimentales y la distribución de tamaños de poros es obtenida en todos los casos estudiados. Se encuentra que el modelo de geometría específica permite una mejor caracterización de estos materiales.

**CTP21.- Análisis teórico de la adsorción de H_2O
sobre $TiO_2(101)$ y $Pt/TiO_2(101)$**

Cecilia I.N. Morgade,^{1,2,3} Gabriela F. Cabeza^{1,2}

1.- IFISUR, UNS-CONICET, Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina

2.- Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur,
Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina

3.- FRBB, Universidad Tecnológica Nacional, 11 de Abril 461, B8000LMI Bahía Blanca, Argentina

Email: ceciliamorgade@yahoo.com.ar

Diversos autores han propuesto diferentes mecanismos para la reacción de WGS (“*water gas shift*”) sobre sistemas *Pt*/titania. Siendo la reducción del agua uno de los pasos fundamentales en la misma y con el propósito de aportar claridad a las diferencias planteadas en la literatura, se realizó un estudio teórico de la adsorción del agua sobre la superficie limpia de anatasa y sobre la misma con *Pt* adsorbido.

El estudio fue llevado a cabo a partir de cálculos ab-initio empleando la Teoría de la Funcional Densidad (DFT+U). El análisis se completó estudiando ambos sistemas con vacancias removiendo un átomo superficial de oxígeno.

Los resultados de distancias, ángulos, cargas y densidades locales de estados del *O* y del *H* del agua adsorbida permiten suponer que la presencia de *Pt* es relevante en la reducción del H_2O y no tanto así la presencia de vacancias como fue postulado por algunos autores. Además de los resultados obtenidos puede postularse que el mecanismo de formación de H_2 a partir de la reacción de WGS en estos sistemas involucraría en primer lugar la reducción del agua y en segundo lugar la oxidación del *CO*.

CTP22.- Crecimiento, desorción térmica y daño por bombardeo iónico en películas delgadas de C_{60} depositados sobre $Cu(111)$

Fernando Bonetto,^{1,2} Ricardo A. Vidal,^{1,3} Vanessa Quintero-Riascos,¹
Claudio J. Bonin,^{1,3} Julio Ferrón^{1,2}

1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Departamento de Materiales (FIQ-UNL), Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

3.- Departamento de Física (FIQ-UNL), Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: bonetto@santafe-conicet.gov.ar

El crecimiento y desorción térmica de C_{60} sobre $Cu(111)$ fue caracterizado por medio de espectroscopia de electrones Auger (AES) e imágenes con difracción de electrones de baja energía (LEED). Las películas de C_{60} fueron crecidas sobre el sustrato por sublimación de C_{60} en una celda de Knudsen a 350 °C, dentro de una cámara de ultra alto vacío ($\sim 10^{-9}$ Torr). Para analizar el daño por bombardeo iónico de la película de C_{60} se siguió la evolución temporal del plasmón característico de los enlaces π de los átomos de carbono que conforman la molécula de C_{60} , mediante espectroscopia de pérdida de energía de electrones (EELS) durante el bombardeo con H^+ , He^+ y Ar^+ , y para energías de incidencia de 2, 4 y 8 keV. Paralelamente, se tomaron espectros Auger antes y después del bombardeo para caracterizar y cuantificar el daño producido. Las dosis y tiempos de bombardeo elegidos fueron los típicos de experimentos de dispersión de iones de baja energía (LEIS).

El presente estudio muestra que: (i) el crecimiento de C_{60} sobre $Cu(111)$ es capa a capa; (ii) la desorción de la primera monocapa es diferente a las demás, quedando solo una monocapa cuando es calentado a 500 °C; y (iii) solo se detectó daño por irradiación cuando la muestra fue bombardeada con Ar^+ .

CTP23.- Estructura de nanopartículas bimetálicas de *NiCu* obtenidas mediante simulaciones de Dinámica Molecular y Montecarlo

Paola Quaino,¹ Gustavo D. Belletti,¹ Dmitrii V. Glukhov,² Renat R. Nazmutdinov²

1.- PRELINE (FIQ-UNL), Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

2.- Kazan National Research Technological University, 420015 Kazan, Rusia

Email: gustavo.belletti@santafe-conicet.gov.ar

Las estructuras de nanopartículas (*NP's*) bimetálicas de *CuNi* son investigadas en función de su composición, forma y tamaño.

Para *NP's* pequeñas (de unos cientos de átomos) se ha empleado el método de Dinámica Molecular Clásica, mientras que han sido realizadas simulaciones de Montecarlo para *NP's* grandes.

Nuestros resultados muestran que la segregación se produce a toda composición de *NP's*. Si la proporción de *Ni* es mayoritaria, los átomos de *Cu* tienden a ensamblarse en la región superficial. En cambio cuando el *Ni* es soluto, sus átomos son los que prefieren segregarse en la superficie de la partícula. Estos resultados concuerdan cualitativamente con los datos experimentales de aleaciones *NiCu* de literatura.

Las estructuras de las *NP's* modeladas difieren, por consiguiente, de las de tipo “*Janus*” y “*core-shell*”, debido a que los átomos metálicos se extienden notablemente a lo largo de la dirección radial. Se observa además que los átomos segregados en la superficie de las *NP's* preferentemente conforman islas. Se discute así, el efecto de tamaño y forma de las *NP's* en la segregación. Finalmente, el énfasis es puesto en la comparación con la información experimental disponible.

CTP24.- Uso de nanomateriales magnéticos para el tratamiento de iones fluoruro en solución**Daniel O. Mártire, Gabriela Bosio, Lucía Morán-Ayala**

*Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicada,
Calle 64 y Diag 113 s/n, 1900 La Plata, Argentina
Email: luciamoran@inifta.unlp.edu.ar*

Objetivos: preparar y caracterizar nanopartículas (*NP's*) magnéticas de óxidos de hierro recubiertas con hidróxido de aluminio (mediante un enlace covalente) para ser usadas como adsorbentes de bajo costo para la remoción de fluoruros.

Introducción: en el presente trabajo proponemos el uso de nanopartículas (*NP's*) de Fe_2O_3 embebidas en hidróxido de aluminio ($Fe_2O_3@Al(OH)_3NP's$) para remover fluoruro. Este material se espera que presente una alta capacidad de adsorción y alta selectividad para fluoruro.

Actividades y Metodología

Preparación: se prepararon *NP's* de maguemitas desnudas por una modificación del método de descomposición térmica de precursores orgánicos [1]. El procedimiento consiste en la mezcla de: éter etílico, ácido oleico, oleilamina y acetilacetato de hierro (III) ($Fe(acac)_3$). Se calentó a 245 °C durante 2 horas, con agitación vigorosa. Se dejó enfriar hasta alcanzar la temperatura ambiente, se le agregó etanol y luego se centrifugó a 6000 rpm durante 15 minutos para lograr la precipitación de las nanopartículas. Finalmente se realizó un lavado con etanol.

Recubrimiento: el recubrimiento de las nanopartículas se realizó según dos métodos diferentes: (1) se empleó el método de bibliografía utilizado para magnetita [2] añadiendo gota a gota una solución de $AlCl_3$ en éter etílico (relación molar 1:3 con la cantidad de hierro presente en la maguemitas sintetizada) a la suspensión de las *NP's* de Fe_2O_3 sonicada en éter etílico. La mezcla resultante se sonicó nuevamente durante 20 minutos. Por último, se adicionaron aproximadamente 10 ml de acetona para facilitar la unión covalente entre las *NP's* y el $Al(OH)_3$. (2) Se suspendieron las partículas de maguemitas en agua bidestilada y se goteó en paralelo, una solución de nitrato de aluminio y otra solución de $NaOH$. Este goteo duró aproximadamente 1 hora.

Caracterización: se evaluaron los espectros FTIR y las imágenes de TEM para las muestras preparadas. Las muestras caracterizadas fueron: Fe_2O_3 , $Fe_2O_3@Al(OH)_3$ (antes de ser sometidas a la adsorción de fluoruro), y $Fe_2O_3@Al(OH)_3$ luego de ser sometidas a distintas concentraciones de fluoruro en solución conocidas.

Ensayos de adsorción de fluoruros: se determinaron las cinéticas de adsorción, para ello se pusieron en contacto soluciones acuosas de los contaminantes con los materiales adsorbentes, los que se separaron magnéticamente a distintos tiempos. Los iones fluoruros en la solución resultante se analizaron mediante un electrodo específico. Además se evaluó el efecto del pH sobre estos procesos.

Resultados: (1) los espectros FTIR muestran un alto recubrimiento de las partículas con $Al(OH)_3$, evidenciado por la banda del enlace $Al-OH$, a 3650 cm^{-1} . (2) El análisis de las imágenes TEM arroja tamaños de partículas de alrededor de 10 nm. (3) Las isothermas de adsorción de fluoruros muestran una remoción más eficiente para aquellas nanopartículas cuya modificación superficial fue realizada en medio orgánico.

[1] I.O. Pérez de Berti, M.V. Cagnoli, G.A. Pecchi-Sánchez, J.L. Alessandrini, S.J. Stewart, J.F. Bengoa, S.G. Marchetti, *Nanotechnology* 24 (2013) 175601-175601.

[2] X. Cui, S. Belo, D. Krüger, Y. Yan, R.T.M. de Rosales *et al.*, *Biomaterials* 35 (2014) 5840-5846.

**CTP25.- Estudio de cristalización de agua por
microscopia de fuerza atómica**

**Melisa M. Gianetti,¹ Julián Gelman-Constantín,²
Horacio R. Corti,^{1,3} M. Paula Longinotti¹**

1.- Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (FCEN-UBA),
Intendente Güiraldes 2160, 1428 CABA, Argentina

2.- División de Química Atmosférica, Gerencia de Química (CAC-CNEA), Avda. General Paz 1499,
1650 San Martín, Buenos Aires, Argentina

3.- Departamento de Física de la Materia Condensada (CAC-CNEA), Avda. General Paz 1499,
1650 San Martín, Buenos Aires, Argentina

Email: mgianetti@qi.fcen.uba.ar

Los estudios sobre la cristalización de agua son de especial interés en áreas como por ejemplo la meteorología, debido a que estos procesos son centrales en fenómenos como la modulación de la radiación solar y los flujos hidrológicos en la atmósfera [1-2].

La microscopia de fuerza atómica (AFM) podría ser una técnica de gran utilidad para estudiar el crecimiento de hielo sobre superficies ya que tiene resolución nanométrica. A pesar de ello, nunca ha sido utilizada hasta el momento con dicho objetivo. Por el contrario, muchos trabajos han sido reportados sobre el estudio por AFM de la capa cuasi líquida (QLL por sus siglas en inglés, “*quasi-liquid-layer*”) formada sobre la superficie de hielo por debajo de la temperatura de fusión [3-4].

En este trabajo, analizamos el crecimiento de hielo desde la fase vapor sobre una superficie determinando cómo varían las curvas de fuerza con el tiempo. Las curvas medidas, muestran una zona donde la pendiente es negativa, correspondiente a la QLL, luego una zona de pendiente positiva que corresponde a la indentación de la capa de hielo formada, y por último una zona de pendiente infinita que corresponde a que la punta de AFM ha alcanzado la mica. A partir de la variación del desplazamiento en la dirección z en la zona correspondiente a la indentación de hielo, determinamos la velocidad de crecimiento del mismo. Se realizaron dos series de determinaciones a -2.5 y -5.0 °C. Los resultados indican que el hielo crece sobre la superficie de mica a una velocidad que varía entre 10 y 100 nm/minuto. Por otro lado, se observaron notables diferencias en las curvas de fuerza obtenidas al utilizar puntas “*blandas*” (constante de fuerza, $k = 0.2$ N/m) y “*duras*” ($k = 2.8$ N/m). En el primer caso, las curvas de fuerza obtenidas muestran más sensibilidad en la indentación de hielo, dando como resultado cambios en la pendiente a medida que la punta penetra la fase sólida. En el caso de puntas duras, la pendiente de indentación de hielo tiene un único valor y permite distinguir claramente la zona de no contacto, el hielo y la mica.

Como conclusión, los resultados obtenidos muestran por primera vez que es posible determinar la velocidad de crecimiento de hielo sobre una superficie a humedad y temperatura controladas utilizando AFM.

[1] D.A. Hegg, M.B. Baker, *Reports on Progress in Physics* 72 (2009) 056801.

[2] R.J. Herbert, B.J. Murray, S.J. Dobbie, T. Koop, *Geophysical Research Letters* 42 (2015) 1599-1605.

[3] V.F. Petrenko, *Journal of Physical Chemistry B* 101 (1997) 6276-6281.

[4] A. Döppenschmidt, H.J. Butt, *Langmuir* 16 (2000) 6709-6714.

CTP26.- Adsorción de dopamina sobre Ag(111) y Ag(110)

Ana C. Rossi, Lorena A. Meier, Norberto J. Castellani

IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, UNS,
Avda. L.N. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina
Email: anarossi@ifisur-conicet.gov.ar

La dopamina (DA) es un neurotransmisor que juega un papel fisiológico importante en el sistema nervioso central, renal y hormonal. Por ello resulta de gran interés médico y farmacológico estudiar las interacciones químicas en las que esta molécula interviene. En particular, la deficiencia de dopamina es un indicativo de enfermedades tales como Parkinson, epilepsia, Alzheimer, depresión o esquizofrenia. Recientemente se han empleado dispositivos para su detección basados en electrodos carbonosos o metálicos formados por oro y óxidos de estaño e indio, modificados químicamente para soportar nanopartículas metálicas de Au y Ag. En el presente trabajo se estudia la adsorción de dopamina neutra sobre las superficies de Ag(110) y Ag(111) mediante el paquete de cálculo VASP (*“Vienna Ab-Initio Simulation Package”*) dentro del formalismo *“Density Functional Theory”*. El sustrato de Ag se modeló mediante *“slabs”* de cuatro y cinco capas para las superficies (111) y (110), respectivamente, relajándose en ambos casos las dos primeras capas atómicas del sustrato de Ag. En los cálculos se tuvieron en cuenta los efectos debidos a las interacciones de tipo vdW. Los valores de energía de adsorción y las distancias interatómicas indican que la adsorción de la molécula es primordialmente de carácter quimisorbtivo. La presencia de dopamina sobre Ag provoca una distorsión local de la superficie que se pudo evaluar calculando las energías de deformación del adsorbato y del sustrato. Dicha distorsión es más significativa en el caso de la cara (110). Se procedió por otro lado a comparar las frecuencias de vibración de la molécula de dopamina en ambas superficies y sus variaciones con respecto a la molécula libre. Se estudió la interacción adsorbato-sustrato analizando la diferencia de densidades de cargas electrónicas con respecto a los fragmentos componentes, las energías electrostáticas involucradas y las densidades de estados de energía. A efectos comparativos se evaluaron asimismo las energías de adsorción de la forma zwitterion de la dopamina sobre las mismas superficies de Ag.

**CTP27.- Nanoporos supramoleculares inteligentes
en la interfaz sólido/líquido**

Fernando Cometto,^{1,2} Klaus Kern,^{2,3} Magalí Lingenfelder²

1.- INFIQC, Departamento de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Córdoba,
X5000HSN Córdoba, Argentina

2.- Max Planck, EPFL Laboratory for Molecular Nanoscience, Institut de Physique de la Matière Condensée,
École Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland

3.- Max-Planck, Institut für Festkörperforschung, D-70569 Stuttgart, Germany

Email: fcometto@fcq.unc.edu.ar

Las monocapas autoensambladas constituyen la base de los nanodispositivos moleculares. Las propiedades de transporte son cruciales en la electrónica molecular y son críticamente determinadas por su conformación dependiente de las interacciones molécula-superficie y molécula-molécula.

La mayoría de las aplicaciones en nanociencia, requieren de la posibilidad de controlar las conformaciones moleculares de manera predictiva. Por ello, en este trabajo utilizamos el campo eléctrico generado en un STM convencional para manipular la transición entre estructuras “*abiertas*” y “*cerradas*” (empaquetadas) en una red supramolecular 2D formada a partir de moléculas neutras en un medio apolar [1]. Encontramos que, mientras la magnitud del campo aplicado no es decisiva, el signo de la polarización debe ser mantenido para seleccionar la estructura deseada. Este comportamiento de tipo “*switch*” es independiente del solvente y es completamente reversible. Además, utilizamos este efecto para controlar la captura y liberación de diferentes tipos de analitos (coroneno, nanografeno, fullereno y nanopartículas de *Au*) en sistemas tipo “*host-guest*” [2].

[1] F. Cometto, K. Kern, M. Lingenfelder, *ACS Nano* 9 (2015) 5544-5550.

[2] S-L. Lee, Y. Fang, G. Velpula, F. Cometto, K. Mali, K. Müllen, M. Lingenfelder, S. De Feyter, *ACS Nano* 9 (2015) 11608-11617.

CTP28.- Modificación de sustratos de carbono con polímeros hiperramificados Boltorn® de diferentes generaciones, H20/H30/H40: caracterización y estudio comparativo**Eliana D. Farias,¹ Mario C.G. Passeggi (h),^{1,2} Verónica Brunetti³***1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina**2.- Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina**3.- Instituto de Investigaciones en Físico-química de Córdoba (INFIQC, CONICET-UNC), Haya de la Torre s/n, X5000HSN Córdoba, Argentina**Email: elianadfarias@gmail.com*

Los polímeros hiperramificados (HB del inglés “*hyperbranched*”) son moléculas de tipo dendríticas aunque con una topología de rama aleatoria. A pesar de tener una estructura menos controlada que los dendrímeros, los HB son capaces de presentar efecto dendrítico teniendo la ventaja de ser sintetizados con mayor facilidad. Poseen alta reactividad, numerosos grupos funcionales periféricos, así como también grupos funcionales terminales internos, cavidades internas capaces de alojar nanoestructuras, facilidad de síntesis a gran escala y variadas aplicaciones en diversos campos, desde la medicina a la nanotecnología [1,2].

El uso de este tipo de moléculas como bloques constructores capaces de formar estructuras autoensambladas es de gran interés en ciencia de materiales; dando acceso a arquitecturas complejas mediante el uso de interacciones no covalentes. Las mismas, dependiendo de la naturaleza del grupo funcional periférico y la naturaleza del esqueleto, pueden resultar adecuadas ya sea como plantillas, soporte de biomoléculas o plataforma reactiva para algún analito de interés en el desarrollo de sensores [3]. Estas superficies híbridas, caracterizadas por ser hiperfuncionalizadas y multiramificadas, se denominan superficies dendronizadas. Por otro lado, el comportamiento de los polímeros confinados a una superficie o bien que estén formando películas delgadas puede ser muy diferente a aquel propio del polímero puro o bien en solución. En ese sentido, la caracterización de los sistemas híbridos desarrollados es de gran importancia. El estudio fisicoquímico de la superficie dendronizada, su comportamiento ácido-base, temperatura de transición vítrea y morfología, entre otras cosas, son aspectos claves que juegan un rol importante en muchas aplicaciones tecnológicas.

En este trabajo se presenta la caracterización fisicoquímica de superficies de carbono modificadas con polímeros hiperramificados de la familia Boltorn® de diferentes generaciones (H20, H30 y H40). El grado de cubrimiento se determinó por métodos electroquímicos, asociado al efecto en la transferencia de carga de cuplas redox de comportamiento conocido. Se presentan además curvas de titulación impedimétrica que dan cuenta del pKa aparente para el polímero confinado en la superficie. Por último, se presentan los resultados electroquímicos y el análisis morfológico empleando microscopia de fuerza atómica, asociado a la determinación de la temperatura de transición vítrea de la película.

[1] Y. Huang, D. Wang, X. Xhu, D. Yan, R. Chen, *Polymer Chemistry* 6 (2015) 2794-2812.

[2] Y. Chen, L. Wang, H. Yu, Y. Zhao, R. Sun, G. Jing, J. Huang, H. Khalid, N. M. Abbasi, M. Akram, *Progress in Polymer Science* 45 (2015) 23-43.

[3] E.D. Farias, M.C.G. Passeggi (h), V. Brunetti, *Revista Materia* 20 (2015) 772-778.

CTP29.- Estudio de la inserción de *Fe* en nanotubos de carbono y su efecto en la adsorción de O_2

Leonardo F. Peiretti, Gustavo D. Belletti, Paola Quaino

PRELINE, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: lfpeiretti@fiq.unl.edu.ar

Se analizó el efecto de la inserción de *Fe* dentro de dos tipos de nanotubos de carbonos de pared simple. Para el análisis se consideraron nanotubos del tipo (5,5) y (8,0), los cuales son conductor y semiconductor, respectivamente. Se estudiaron cuatro geometrías distintas de *Fe*: átomo, dímero, trímero y cadena infinita. El átomo de *Fe* mostró una adsorción más favorable en el sitio “*hollow*” que en el centro del nanotubo para ambos casos. Además, se observó que la energía de adsorción del *Fe* aumenta a medida que la cadena de *Fe* se hace más larga y se vuelve más favorable para el nanotubo semiconductor (8,0). Para el caso de la cadena infinita de *Fe*, un arreglo en “*zig-zag*” permitió minimizar la energía, manteniendo la distancia *Fe-Fe* lo más cercana posible a la del trímero. Adicionalmente, se estudió la adsorción de O_2 sobre los sistemas compuestos. Se encontró que la energía de adsorción mejora con la inclusión del *Fe* en el nanotubo y disminuye la energía de disociación del O_2 , lo cual lo convierte en un prometedor sistema para las celdas de combustible de hidrógeno.

CTP30.- Estructura de monocapas autoensambladas de MBA sobre Au(110) revelada por SPM/DFT

Nadine Hauptmann,¹ Paula Abufager,² Roberto Robles,³
Nicolás Lorente,⁴ Richard Berndt¹

1.- Institut für Experimentelle und Angewandte Physik Christian-Albrechts, Universität zu Kiel, Kiel, Alemania

2.- Instituto de Física de Rosario (CONICET-UNR), Rosario, Argentina

3.- Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), Barcelona, España

4.- Centro de Física de Materiales CFM/MPC, Donostia-San Sebastián, España

Email: paulaabufager@gmail.com

El interés en el estudio de la adsorción de moléculas en superficies proviene de la capacidad que poseen estas moléculas de autoensamblarse y crear estructuras funcionalizadas. Estas monocapas autoensambladas (*SAM's*) permiten modificar de manera controlada propiedades de la superficie lo cual las hace blancas de potenciales aplicaciones tecnológicas.

La presente contribución reporta un estudio teórico-experimental sobre la estructura y estabilidad de *SAM's* de MBA (mercaptobenzoic acid) en Au(110). Mediante microscopia STM (Scanning Tunneling Microscopy) y AFM (Atomic Force Microscopy) en conjunción con cálculos basados en la teoría de la funcional densidad hemos podido dilucidar la geometría de adsorción de las moléculas en la superficie como así también estimar las contribuciones de cada una de las principales interacciones a la estabilidad de la *SAM's*. Simulaciones teóricas de experimentos AFM permiten determinar que la interacción covalente molécula-punta metálica en rango atractivo es la principal responsable de la resolución a nivel sub-molecular que se observan en las imágenes experimentales [1].

[1] N. Hauptmann, R. Robles, P. Abufager, N. Lorente, R. Berndt, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 7 (2016) 1984-1990.

CTP31.- Electrogenación de superficies poliméricas basadas en ftalocianinas de Zn y Cu: aplicaciones en dispositivos electrocrómicos

**Claudia Solís, Lorena Macor, Estefanía Baigorria, María E. Milanesio,
Edgardo Durantini, Luis Otero, Miguel Gervaldo**

Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto, X5804BYA Río Cuarto, Argentina

Email: csolis@exa.unrc.edu.ar

Introducción: la síntesis y estudio de nuevos materiales orgánicos con características electrocrómicas son de sumo interés para el desarrollo de dispositivos en el campo de la optoelectrónica. Las ftalocianinas (*Pc*) presentan una gran relevancia en el área de los materiales moleculares ya que muestran fuerte absorción óptica en la zona rojo/infrarrojo cercano, además de una gran estabilidad. Las *Pc* pueden ser modificadas en la periferia con grupos funcionales que permitan su electropolimerización sobre diferentes sustratos [1]. Los monómeros de ftalocianinas pueden ser electropolimerizado de manera mono y bidimensional, lo cual permite consecuentemente modular el comportamiento eléctrico y óptico de estos compuestos [2].

Objetivos: llevar a cabo la síntesis de los monómeros de ftalocianina conteniendo zinc (*Pc-Zn*) y cobre (*Pc-Cu*) como átomo central, y subsituídos con grupos carbazol (CBZ) en la periferia de forma tal que permitan su electropolimerización sobre electrodos conductores. Realizar la caracterización de los procesos redox en solución tanto del monómero como de la película electrogenerada.

Resultados: fue posible la obtención de películas de ftalocianinas tanto para *Pc-Zn* y *Pc-Cu* mediante el ciclado electroquímico en la ventana de potencial adecuada. Si el ciclado se realiza hasta el pico de oxidación más anódico (oxidación de los grupos CBZ) se observa un aumento en las corrientes de oxidación/reducción, indicando que está ocurriendo la deposición de material electroactivo sobre la superficie del electrodo. Un estudio detallado del comportamiento de las películas obtenidas muestra que existe una proporcionalidad entre las corrientes de pico y la velocidad de barrido lo cual indica que el producto está irreversiblemente adsorbido sobre el electrodo. Por otra parte, los estudios espectroelectroquímicos de las películas muestran la aparición/desaparición de bandas de absorción en distintas longitudes de onda debido a la oxidación de los diferentes grupos que conforman el polímero.

Conclusiones: se logró electropolimerizar nuevas superficies poliméricas de ftalocianinas de Zn y Cu a partir de sus monómeros, sobre electrodos de Pt e ITO. Las películas electrogeneradas presentaron diferentes coloraciones dependiendo del potencial aplicado, demostrando así su aplicación en dispositivos electrocrómicos.

[1] Ö. İpsiz, H.Y. Yenilmez, K. Kaya, A. Koca, Z.A. Bayır, *Synthetic Metals* 217 (2016) 94-101.

[2] C. Solís, E. Baigorria, M.E. Milanesio, G. Morales, E.N. Durantini, L. Otero, M. Gervaldo, *Electrochimica Acta* 213 (2016) 594-605.

CTP32.- Modificación de la expresión quiral de (MP) 5-Amino[6] Helicenos mediante una aleación de superficie

**Javier D. Fuhr,¹ Maarten W. Van der Meijden,² Lucila J. Cristina,^{1,3}
Luis M. Rodríguez,¹ Richard M. Kellogg,² Julio E. Gayone,¹
Hugo Ascolani,¹ Magalí Lingenfelder³**

1.- Centro Atómico Bariloche, CNEA, Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n, R8402AGP Bariloche, Argentina

2.- Syncom BV, Kadijk 3, 9747 AT Groningen, The Netherlands

3.- Instituto de Física del Litoral (IFIS Litoral), CONICET-UNL, Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

4.- Max Planck, EPFL Laboratory for Molecular Nanoscience, EPFL SB CMNT NL-CMNT,
CH 1015 Lausanne, Switzerland

Email: ascolani@cab.cnea.gov.ar

Desde el descubrimiento del origen molecular de la quiralidad los científicos han tratado de comprender qué factores determinaban la organización en cristales de moléculas quirales. La pregunta es si una mezcla racémica (50 % M/50 % P) precipitará espontáneamente formando cristales enantioméricamente puros (conglomerados) o si en cambio se formará una solución aleatoria que cristalizará como un compuesto racémico. Se sabe que aproximadamente entre el 90-95 % de todas las mezclas racémicas cristalizan como compuestos racémicos.

La deposición sobre una superficie no sólo confina en un plano a las moléculas sino que también agrega la interacción molécula-superficie que compite con las fuerzas intermoleculares. Como resultado de ello, la formación de conglomerados es más favorable y muchas moléculas, que naturalmente formarían un compuesto racémico 3D, se arreglan en conglomerados 2D cuando se adsorben sobre una superficie. Una excepción a esta tendencia son las moléculas de helicenos que tienden a formar compuestos racémicos en superficies. Estas moléculas consisten en varios anillos de benceno unidos de manera que comparten uno de sus lados y toman la forma de un hélice.

En este trabajo mostraremos la primera investigación sobre la molécula quiral 5-Amino [6] Heliceno (AH) en una aleación de superficie. En particular, utilizamos como sustrato la aleación de superficie que forma el sistema Sn/Cu(100) a temperatura ambiente. En un trabajo previo hemos visto que la modificación de la superficie Cu(100) mediante la adsorción de Sn lleva a un comportamiento similar a Au(111) respecto a la adsorción de moléculas aromáticas pequeñas [1]. En el presente trabajo estudiamos las propiedades de autoensamblado del racemato de AH (50 % M/50 % P) sobre las superficies Cu(100) y 0.5 MC de Sn sobre Cu(100) combinando experimentos de STM realizados en condiciones de ultra alto vacío con cálculos a partir de la Teoría de Funcional Densidad (DFT).

Encontramos que la modificación de la superficie Cu(100) mediante la predeposición de Sn permite sintonizar la interacción molécula-superficie y modificar la expresión quiral de AH desde un ensamblado aleatorio en la superficie Cu(100) pura hasta un compuesto racémico 1:1 idéntico al que forman sobre Au(111) [2,3].

[1] A. Carrera, L.J. Cristina, S. Bengio, A. Cossaro, A. Verdini, L. Floreano, J.D. Fuhr, J.E. Gayone, H. Ascolani, *The Journal of Physical Chemistry C* 117 (2013) 17058-17065.

[2] M.W. Van der Meijden, E. Gelens *et al.*, *Chemistry-A European Journal* 22 (2016) 1484-1492.

[3] J. Fuhr, M.W. Van der Meijden, L. Cristina, L.M. Rodríguez, R.M. Kellogg, J.E. Gayone, H. Ascolani, M. Lingenfelder, enviado a *Chemical Communications* (2016).

CTP33.- Redes metal-orgánicas en superficies

Luis M. Rodríguez,¹ Paloma Machaín,¹ Luciano Robino,¹
Marcos Domínguez-Rivera,³ Alberto Verdini,³ Luca Floreano,³
Javier D. Fuhr,¹ Julio E. Gayone,¹ Hugo Ascolani¹

1.- Centro Atómico Bariloche. CNEA y CONICET, Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n,
R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

2.- Instituto Balseiro, Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n, R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

3.- CNR-IOM, Laboratorio TASC, Basovizza SS14 Km. 163.5, I-34149 Trieste, Italy

Email: gayone@cab.cnea.gov.ar

La formación de redes de coordinación metal-orgánicas es una vía en pleno desarrollo para crecer nanoestructuras bidimensionales en superficies. Un sistema prototipo son las redes metal-orgánicas que utilizan a la molécula de 7,7,8,8 tetra-cianoquinodimetano (*TCNQ*) como ligando. Las moléculas de *TCNQ* consisten en un anillo de carbono central funcionalizado con cuatro grupos cianos (-CN) y se caracterizan por ser un potente aceptor orgánico. Para el caso de adsorción de estas moléculas en superficies metálicas, los procesos de transferencia de carga, y en consecuencia, las propiedades fisicoquímicas de los ensamblados moleculares dependen fuertemente del tipo de sustrato. En tal sentido, un punto clave que define la funcionalidad de las redes metal-orgánicas bidimensionales formadas con *TCNQ* es el balance entre las interacciones de las moléculas con el sustrato y de las moléculas con los centro metálicos.

En el sistema *Sn/Cu*(100) los átomos de *Sn* depositados sobre la superficie de *Cu*(100) sustituyen a los átomos de *Cu* de la primera capa, formando una aleación de superficie. Esta interfase constituye un sustrato muy interesante ya que hemos observado que la incorporación de *Sn* afecta significativamente la adsorción y posterior autoensamblado de diferentes tipos de moléculas orgánicas [1,2]. En este trabajo presentaremos el estudio del autoensamblado de moléculas de *TCNQ* sobre la aleación *Sn/Cu*(100) combinando STM, XPS, NEXAFS y cálculos de DFT. Hemos encontrado que la formación de la aleación modifica completamente las propiedades de adsorción de *TCNQ*, reduciendo fuertemente la interacción molécula-sustrato. En particular, nuestros resultados muestran que hay una migración de átomos de *Cu* hacia la capa de moléculas de manera que se forma una red de coordinación *Cu:TCNQ* autoensamblada sobre la aleación *Sn/Cu*. A su vez, presentaremos resultados muy recientes de la formación de redes metal-orgánicas basadas en *Sn* y *TCNQ* sobre *Au*(111). Nuestros experimentos de STM, combinados con cálculos de DFT, muestran que es posible crecer una red de coordinación *Sn:TCNQ*, sobre *Au*(111) a RT en condiciones de UHV.

[1] A. Carrera, L.J. Cristina, S. Bengió, A. Cossaro, A. Verdini, L. Floreano, J.D. Fuhr, J.E. Gayone, H. Ascolani, *The Journal of Physical Chemistry C* 117 (2013) 17058-17065.

[2] J. Fuhr, M.W. Van der Meijden, L.J. Cristina, L.M. Rodríguez, R.M. Kellogg, J.E. Gayone, H. Ascolani, M. Lingenfelder, enviado a *Chemical Communications* (2016).

CTP34.- Descripción teórica de la transferencia de carga en colisiones de iones Ga^+ con una superficie de Au **Marcos Tacca,¹ Fernando Bonetto,^{1,2} Edith C. Goldberg^{1,2}**

1.- Instituto de Física del Litoral (CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: marcos.tacca@santafe-conicet.gov.ar

Resultados experimentales de la neutralización de iones positivos de Sr y Ga dispersados por una superficie de Au [1] muestran, a través de su dependencia con la temperatura, señales aparentes de interacción electrónica en el estado localizado. Motivado por estos resultados, se ha realizado un estudio a partir de primeros principios de la fracción de átomos neutros resultantes de la colisión de iones de Sr^+ sobre Au [2].

El propósito del presente trabajo es extender el modelo desarrollado a átomos con estados de valencia que presentan degeneración orbital además de la de espín. En particular, se busca su aplicación al caso del ión Ga^+ , en el cual la neutralización ocurre a un orbital p que asintóticamente (lejos de la superficie) tiene tres posibilidades degeneradas, de manera de comparar las predicciones teóricas con los resultados experimentales disponibles en el trabajo citado.

La descripción del sistema se realiza a través de un Hamiltoniano de Anderson proyectado sobre los estados de configuración atómica más probables. Los términos del Hamiltoniano son calculados utilizando un modelo de enlace de a pares [3], desarrollado en el grupo y usado exitosamente en numerosos trabajos previos [4]. Las probabilidades de neutralización son calculadas utilizando funciones de Green-Keldysh, calculadas mediante el método de las ecuaciones de movimiento y cerrando el sistema en un segundo orden en la interacción átomo-banda.

Los tres orbitales tipo p disponibles del Ga^+ , degenerados en el átomo aislado, se desdoblan cuando este se aproxima a la superficie. El orbital p_z , orientado de manera perpendicular a la superficie, se separa de los dos restantes (p_x y p_y), que continúan siendo degenerados. Cada orbital se acopla de manera diferente con la banda del sólido.

Resultados preliminares muestran una buena correspondencia entre la descripción teórica y los resultados experimentales. Se observó una variación en la fracción de neutros de entre un 27 % a 300 K y un 33 % a 900 K. Se determinó que la principal contribución al número de ocupación viene dada por el estado p_z . La dependencia de la probabilidad de neutralización medida con la temperatura es ligeramente no lineal, que se corresponde con el comportamiento de la contribución a la neutralización de los estados degenerados p_x y p_y calculado.

[1] X. He, J.A. Yarmoff, *Physical Review Letters* 105 (2010) 176806.[2] F. Bonetto, C. González, E. C. Goldberg, *Physical Review B* 93 (2016) 195439.[3] P.G. Bolcatto, E.C. Goldberg, M.C.G. Passeggi, *Physical Review B* 58 (1998) 5007.[4] F.J. Bonetto, M.A. Romero, A. Iglesias-García, R.A. Vidal, E.C. Goldberg, *The Journal of Physical Chemistry C* 119 (2015) 3124.

CTP35.- Formación de compuestos carbonados sobre Cu(111) inducida por electrones de baja energía

Carlos Silva,¹ Silvia S. Montoro,^{1,2} Fernando Bonetto,^{1,2}
Ricardo A. Vidal,^{1,2} Julio Ferrón^{1,2}

1.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- Facultad de Ingeniería Química (Universidad Nacional del Litoral),
Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: silva2075@gmail.com

En este trabajo hemos realizado un estudio de la deposición de moléculas de etileno, estimulada por el bombardeo con electrones de baja energía, sobre la superficie de un monocristal de Cu(111), utilizando Espectroscopia de electrones Auger (AES) y Espectroscopia de pérdida de energía de electrones (EELS). Estas técnicas nos permitieron determinar la cantidad relativa de carbono depositado sobre la superficie e inferir el tipo de enlaces carbono-carbono que forman los átomos sobre la superficie.

La deposición estimulada se realizó en condiciones de ultra alto vacío (UHV), variando tanto la presión del etileno como la temperatura de la superficie del monocristal. La irradiación se realizó con electrones de 350 eV de energía y con una densidad de corriente de $\sim 2 \text{ mA/cm}^2$. En todas las mediciones se partió de una muestra de Cu limpiada in situ mediante bombardeo con iones Ar^+ y reconstruida por calentamiento a una temperatura de 820 K.

Se encontró que a bajas exposiciones la temperatura del sustrato influye poco en la cantidad de carbono depositado. A altas exposiciones de etileno se observa que el incremento de la temperatura del sustrato provoca una menor deposición de carbono. Sin embargo, un análisis de la forma de los espectros Auger finales del C_{KLL} medidos después de cada deposición demuestra que la estructura química de los compuestos de carbono es la misma.

Para exposiciones menores a 4000 L la velocidad de deposición de carbono es prácticamente independiente de la presión de etileno y de la temperatura del sustrato. A partir de 4000 L comienza a notarse una dispersión en los valores de la velocidad de deposición. Por otro lado, en los espectros de EELS se observa la existencia del plasmón híbrido ($\pi+\sigma$) que demuestra la existencia de enlaces de tipo sp^2 en las estructuras carbonosas formadas sobre la superficie.

CTP36.- Estudio superficial de nanopartículas de *Ru* soportadas sobre sistemas binarios de *La₂O₃-SiO₂***Betina Faroldi,¹ Patricio Ruiz,² Silvia Irusta,³ Laura M. Cornaglia¹**

- 1.- Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE, UNL-CONICET), FIQ, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina
2.- Institute of Condensed Matter and Nanosciences - Molecules, Solids and Reactivity (IMCN/MOST), Université Catholique de Louvain, Croix du Sud 2/17, 1348 Louvain-La-Neuve, Belgium
3.- Instituto de Nanociencia de Aragón (INA), Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018 Zaragoza, España
Email: bfaroldi@fiq.unl.edu.ar

La utilización del CO_2 ha tomado importancia en los últimos años debido a que es el principal responsable del efecto invernadero y del cambio climático. Aún más promisorio se presenta la transformación de dicho gas en una molécula de mayor valor agregado. Se puede sumar otra ventaja si se plantea convertir el hidrógeno suministrado por medio de procesos limpios (paneles solares, biomasa, etc.), en una fuente más fácilmente explotable de energía, como lo es el metano [1]. En este trabajo, se sintetizaron catalizadores de $\text{Ru}/\text{La}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ y Ru/SiO_2 utilizando un método de preparación simple como la impregnación a humedad incipiente empleando como compuesto precursor $\text{Ru}(\text{NO})(\text{NO}_3)_3$ o RuCl_3 , con el objetivo de obtener elevadas dispersiones del metal y sólidos activos a bajas temperaturas para la reacción de metanación de CO_2 . Se estudian los tamaños de partículas, la composición superficial y los estados de oxidación del Ru bajo diferentes tratamientos variando la concentración de La_2O_3 y el precursor de Ru empleado.

Las relaciones superficiales $\text{Ru}/(\text{La}+\text{Si } 2s)$ se determinaron mediante XPS de los sólidos reducidos a 400 °C en la cámara de reacción del espectrómetro. Se observó la reducción completa a Ru^0 en todas las muestras. La concentración superficial $\text{Ru}/(\text{La}+\text{Si})$ aumenta a medida que aumenta el contenido de lantano y disminuye la superficie específica del sustrato.

Se obtuvieron partículas menores a 1 nm utilizando $\text{Ru}(\text{NO})(\text{NO}_3)_3$ como sal precursora, mientras que con RuCl_3 las nanopartículas depositadas fueron de 2.5-3.8 nm. Los catalizadores de Ru fueron evaluados en la reacción de metanación de dióxido de carbono en un rango de temperatura entre 150 y 200 °C en condiciones diferenciales.

Cuando se empleó $\text{Ru}(\text{NO})(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ como sal precursora sobre sustratos binarios, se obtuvo una elevada dispersión metálica siendo las nanopartículas de Ru menores a 1 nm. Sin embargo, cuando se utilizó SiO_2 se obtuvieron partículas de Ru de mayor tamaño, siendo éstas las más activas presentando un TOF de 9.7 s^{-1} . Todos los sólidos fueron activos y estables para la reacción de hidrogenación de CO_2 a baja temperatura.

Mediante la utilización de distintas técnicas de caracterización se propuso un modelo considerando la formación de una fase de disilicato de lantano superficial para los sólidos con diferentes cargas de lantano [2]. Las imágenes de TEM y los análisis químicos obtenidos permitieron reforzar el modelo propuesto para los catalizadores de Ru sobre soportes binarios $\text{La}_2\text{O}_3(x)\text{-SiO}_2$.

[1] T. Sakakura, J. Choi, H. Yasuda, *Chemical Reviews* 107 (2007) 2365-2387.

[2] B. Faroldi, E. Lombardo, L.M. Cornaglia, *Applied Catalysis A: General* 369 (2009) 15-26.

Reacciones Químicas en Superficies

CTP37.- Deshidratación selectiva de glicerol a acroleína: desarrollo de zeolitas modificadas por tratamiento alcalino con Na_2CO_3 **Camila D. Lago, Bruno O. Dalla-Costa, Hernán P. Decolatti, Carlos A. Querini**

*Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE-CONICET),
Santiago del Estero 2654, 3000 Santa Fe, Argentina
Email: clago@fiq.unl.edu.ar*

Como consecuencia de la sobreoferta de glicerol a bajo costo así como también de su carácter renovable, éste se ha convertido en una materia prima de gran interés para la producción de commodities y pseudocommodities [1]. La deshidratación de glicerol conduce principalmente a la formación de dos importantes productos químicos: 3-hidroxipro-pionaldehído y acroleína. Actualmente la acroleína se obtiene por oxidación parcial de propileno, empleando una mezcla de óxidos metálicos como catalizador [2]. En consecuencia, la producción de acroleína a partir de glicerol representa una alternativa económica y sustentable para reemplazar la tecnología empleada actualmente. La acroleína se usa en la producción de ácido acrílico, ésteres de ácido acrílico, polímeros superabsorbentes, detergentes, fragancias, colorantes y agroquímicos como metionina entre otros. La producción de acroleína por deshidratación de glicerol puede ser llevada a cabo en fase gas o en fase líquida sobre catalizadores sólidos ácidos. Catalizadores como sulfatos, fosfatos y zeolitas entre otros han sido empleados en reacción en fases gaseosa y líquida. La actividad catalítica del sólido es función de sus propiedades texturales y ácidas. Algunos autores sostienen que el tamaño medio de los poros es el factor limitante de la reacción. No obstante, la densidad total de sitios, el tipo de sitios (Brönsted/Lewis) y su fuerza ácida son factores determinantes en la performance del catalizador. El empleo de zeolitas ofrece varias ventajas ya que las mismas son estables térmica y químicamente, no corrosivas, amigables con el medio ambiente, económicas y versátiles, al mismo tiempo que debido a su estructura presentan excelente selectividad de forma. No obstante, la naturaleza microporosa de las mismas conduce a la existencia de limitaciones difusivas en reacción así como también a una rápida desactivación y consecuente baja estabilidad catalítica. Es por esto que nuevos métodos de preparación y procedimientos de post-tratamiento para crear mesoporosidad están siendo intensamente investigados. Una de las alternativas consiste en tratar la zeolita con una base, lo que en determinadas condiciones conduce a una extracción selectiva de silicio de la red [3]. De este modo se logra incrementar el tamaño de poro sin destruir la estructura de la zeolita y conservando sus propiedades ácidas. En el presente trabajo se estudia la reacción de deshidratación de glicerol a acroleína sobre catalizadores sólidos ácidos. Se emplean zeolitas *HZSM-5* (*Si/Al*: 15-40) modificadas por tratamiento alcalino. El tratamiento de estos materiales con soluciones acuosas de Na_2CO_3 de distintas concentraciones conduce a cambios en la porosidad y en la cantidad y tipo de sitios ácidos de los mismos. Se observa que para la mayoría de las condiciones de tratamiento la performance del catalizador mejora notablemente respecto de la zeolita de partida, aumentando los niveles de conversión y la selectividad a acroleína. El tratamiento con solución 0.2 molar de Na_2CO_3 permitió sintetizar un catalizador con excelente selectividad (97 %), que se mantiene prácticamente constante durante 7 horas de reacción, y en niveles aceptables de conversión. Se observan variaciones tanto en las propiedades estructurales de los catalizadores preparados como en sus características ácidas. La porosidad, el área total, la densidad total y el tipo de sitios así como también su fuerza ácida, evidenciaron tener una gran influencia sobre selectividad, conversión y estabilidad de los catalizadores.

[1] M. Pagliaro, R. Ciriminna, H. Kimura, M. Rossi, G. Della-Pina, *Angewandte Chemie* 46 (2007) 4434.

[2] Y. Moro-Oka, W. Ueda, *Advances in Catalysis* 40 (1994) 233.

[3] Y. Tao, H. Kanoh, L. Abrams, K. Kaneko, *Chemical Reviews* 106 (2006) 896.

CTP38.- Estudio en DFT y modelo cinético de la formación de agua sobre $Fe(100)$

Daniel H. Linares, Sebastián Amaya-Roncancio, Karim Sapag

Instituto de Física Aplicada INFAP-UNSL, San Luis, Argentina

Email: sebastianamayaroncancio@gmail.com

En este trabajo utilizamos las barreras de reacción calculadas a partir de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), para realizar un modelo cinético y Monte Carlo Cinético, con el que se dilucida la verdadera naturaleza del paso de la reacción catalítica $O+H$ a H_2O sobre $Fe(100)$, se encontró que la ventana de reacción de la formación de agua a presiones de 2 MPa, siendo estos datos consistentes con los valores experimentales reportados. Adicionalmente, se encontró una coexistencia de los mecanismos de oxidación debido a las diferentes poblaciones de oxígeno adsorbido y del camino de formación de agua. Por último, se observa que a medida que en el modelo cinético de esta reacción química, se desbloquea la formación de diferentes rutas, la ventana de reacción de la formación de esta especie se amplía hasta los 350 K. Con este estudio damos un aporte al entendimiento del paso inicial de la formación de H_2O en la síntesis de Fischer-Tropsch (FTS).

CTP39.- El rol del sustrato en el estudio de la interface de nanoclusters de Pt_4 depositados sobre $TiO_2(110)$ y $TiO_2(101)$

Abel S. Maldonado,^{1,2} Cecilia I.N. Morgade,³⁻⁵ Susana B. Ramos,^{1,2} Gabriela F. Cabeza^{3,4}

1.- Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Neuquén, Argentina

2.- Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas
CONICET - UNCo, Neuquén, Argentina

3.- Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina

4.- CONICET - IFISUR, Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina

5.- Facultad Regional Bahía Blanca, Universidad Tecnológica Nacional Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina
Email: gcabeza@uns.edu.ar

Nanoclusters metálicos depositados sobre óxidos como soporte juegan un rol importante para el diseño de catalizadores modelo con aplicaciones en catálisis heterogénea. El óxido contribuye a estabilizar las nanopartículas evitando su sinterización. Metales nobles soportados como el Pt sobre óxidos reducibles como la titania, han mostrado ser eficientes para la reacción de WGS (“*water gas shift*”). A partir de cálculos ab initio empleando la Teoría de la Funcional densidad (DFT+U) se estudiaron las propiedades energéticas y estructurales de clusters de Pt_4 en configuraciones tetraédrica y planar depositados sobre las superficies de rutilo $TiO_2(110)$ y anatasa $TiO_2(101)$. Para ambos sustratos se estudió la estabilidad relativa de las estructuras de los clusters, determinando las geometrías de equilibrio, las energías de adsorción, los efectos de transferencia de carga y la densidad electrónica de los estados para caracterizar los diferentes aspectos de la interacción metal-óxido. En particular, estamos interesados en la actividad potencial de estos sistemas para evaluar la oxidación de CO adsorbido sobre Pt presente como paso intermedio en la mencionada reacción de WGS.

CTP40.- Estudio teórico de la reacción de reducción de oxígeno sobre superficies de *Pd* y modificadas con *Au*: electrónica y cinética

Érica Schulte,¹ Paola Quaino,¹ Mauricio Arce²

1.- PRELINE (FIQ-UNL), Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

2.- Grupo de Caracterización de Materiales, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Avda. E. Bustillo Km. 9.8 s/n, R8402AGP San Carlos de Bariloche, Argentina

Email: erischulte53@gmail.com

Uno de los retos en la catálisis, es el diseño de materiales que puedan ser reutilizados sin perder su actividad química y así reducir desechos contaminantes.

En este sentido, los estudios a partir de primeros principios resultan ser una herramienta valiosa para favorecer la performance de diversas reacciones sobre distintos materiales.

La reacción de reducción de oxígeno (ORR), en particular, es una de las reacciones más importantes en electroquímica, no sólo por su participación en las celdas de combustible (cátodo), sino por la elevada complejidad que presenta su mecanismo. En el presente trabajo se ha realizado un estudio completo de dicha reacción sobre diferentes materiales: *Pd*(100), *Rh*(100), *Au*(100) y *Pd* modificados con *Au* (1 *Pd*/2 *Au* y 2 *Pd*/1 *Au*). Los cálculos periódicos de DFT fueron llevados a cabo usando el código JACAPO, donde las interacciones de correlación e intercambio se trataron con la aproximación GGA-PBE.

En este contexto, se ha analizado: los materiales electródicos (sin absorbato), la termodinámica de los intermediarios de reacción sobre las superficies y los caminos de mínima energía (cinética) para dos etapas determinantes del mecanismo: la adsorción disociativa de la molécula de oxígeno (ruta directa) y la adsorción disociativa de la especie superóxido (ruta indirecta). Los cálculos se orientaron a interpretar que es lo que ocurre en la región interfacial de los materiales mixtos.

Se observaron importantes modificaciones en la conducta de los intermediarios por la presencia de la juntura bimetalica, confirmando que existe un efecto sinérgico en dicha interface, debido principalmente a cambios inducidos en la estructura electrónica de cada metal en contacto.

CTP41.- Estudio de la adsorción de acetonitrilo sobre platino por Espectroscopia Infrarroja en fase líquida (ATR) y modelado teórico

**Lautaro Vogt,^{1,2} Alejo Aguirre,¹ Leonardo F. Peiretti,²
Paola Quaino,² Sebastián Collins¹**

1.- Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC),
Universidad Nacional del Litoral - CONICET, S3000GLN Santa Fe, Argentina

2.- PRELINE, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral,
S3000AOM Santa Fe, Argentina

Email: scollins@santafe-conicet.gov.ar

Las aminas son compuestos químicos de gran importancia industrial ya que son utilizadas en una gran cantidad de aplicaciones, tales como producción de medicamentos, polímeros, textiles, agroquímicos, *etc.* La hidrogenación catalítica de nitrilos es una ruta importante para la síntesis de aminas y ha sido estudiada principalmente sobre catalizadores de metales de transición: *Ni, Co, Ru, Rh, Pt* y *Pd*.

En este trabajo se investigó la adsorción de acetonitrilo (*AN*) sobre platino, la cual constituye la primera etapa de la reacción y es determinante en la distribución de productos, e.g. aminas primarias, secundarias o terciarias.

Se empleó espectroscopia infrarroja *in-situ* en modo de reflexión total atenuada (ATR) para estudiar la adsorción de *AN* disuelto en tolueno sobre una película de platino depositado sobre un cristal de *ZnSe*. El *Pt* se depositó por deposición física de vapor (PVD). Mediante experimentos de espectroscopia de excitación modulada (MES) acoplada con análisis de detección sensible a la fase (PSD) se logró identificar una señal IR a 2265 cm^{-1} asignada a especies *AN* adsorbida sobre *Pt*.

Adicionalmente, la adsorción del *AN* sobre una superficie de *Pt*(111) fue estudiada por DFT periódica, utilizando el código VASP. Diferentes configuraciones de *AN* fueron investigadas en sitios de alta simetría, llevándose a cabo análisis energético (estabilidad), configuracional (geométrico), de estructura electrónica (naturaleza del enlace) y vibracional. Los resultados obtenidos permitieron identificar dos especies altamente estables adsorbidas sobre la superficie de *Pt*, cuyas frecuencias vibracionales calculadas confirman que la especie *AN*, observada experimentalmente, corresponde a la adsorción de la molécula en forma lineal perpendicular a la superficie mediante un enlace *N-Pt*.

CTP42.- Películas de silanos depositadas sobre acero, zinc pulido y anodizado investigadas mediante técnicas electroquímicas y ópticas

Jorge O. Zerbino,¹ Alberto Maltz,² Cecilia Deya,³
Cecilia I. Elsner,³ Alejandro R. Di Sarli³

1.- INIFTA, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas, Teóricas y Aplicadas
(CICPBA-CONICET, La Plata), C.C. 16 Suc. 4, 1900 La Plata, Argentina

2.- Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP), 1900 La Plata, Argentina

3.- CIDEPINT, Centro de Investigaciones y Desarrollo en Tecnología de Pinturas
(CICPBA-CONICET, La Plata), Avda. 52 entre 121 y 122, 1900 La Plata, Argentina

Email: jzerbino@inifta.unlp.edu.ar

Películas de γ -mercaptopropiltrimetoxisilano (MPTMS) fueron depositadas mediante hidrólisis, condensación y curado a 80 °C sobre acero, zinc pulido y anodizado. Las superficies fueron pulidas con pasta de diamante disminuyendo el grano hasta 0.25 μm . Las soluciones de MPTMS fueron 4 y 8 % en agua/metanol 3:2 v/v; debido al escaso mojado en el caso de zinc pulido se agregó surfactante TEGO 652. El anodizado se realizó en NaOH al 10 % v/v y con pulso de 0.12 A/cm² durante 20 segundos [1-2].

Se implementó un programa de cálculo para ajustar los índices ópticos y el espesor que permiten reproducir los valores experimentales elipsométricos de los ángulos Δ y ψ medidos a diferente longitud de onda λ ($405 > \lambda > 580$ nm) y varios ángulos de incidencia ϕ (65°, 69° y 73°) [3].

Sobre acero pulido las medidas elipsométricas muestran efecto de la concentración de MPTMS. Para MPTMS 8 % se miden espesores d de 37 y 160 nm e índices de $1.2 < \eta < 1.4$ y $0.01 < \kappa < 0.03$ disminuyendo la porosidad para el recubrimiento de dos capas. Para MPTMS 4 % los espesores d son de 135 y 380 nm con índices $0.98 < \eta < 1.3$ y $0.03 < \kappa < 0.04$ mostrando un índice de absorción relativamente mayor que para MPTMS 8 %, que se atribuye a un gran incremento del “scattering” por la formación de porosidad de mayor diámetro [4].

En el caso de zinc pulido se obtienen para MPTMS 4 % espesores de 360 nm, índices $\eta \approx 0.97$, $\kappa \approx 0.03$, mientras que para MPTMS 8 % las medidas producen resultados erráticos de Δ y ψ debido a un recubrimiento no homogéneo debido a defectos de mojado.

Para las películas depositadas sobre zinc anodizado se obtienen en el caso de MPTMS 4 % índices $\eta \approx 1.59$, $\kappa \approx 0.09826$ y $d = 1422$ nm para $\lambda = 546$ nm. Las medidas realizadas sobre zinc anodizado libre de silanos o con MPTMS 8 % muestran resultados erráticos que no permiten un ajuste unívoco para los distintos ángulos de incidencia ϕ . Los depósitos de MPTMS 4 % sobre zinc anodizado logran una mejor difusión y mojado en todo el espesor del óxido obteniéndose una película más homogénea y de baja rugosidad. En el caso de zinc anodizado la falta de convergencia para las medidas a distintos ángulos ϕ , se atribuye a una mayor rugosidad e inhomogeneidad del óxido de zinc. También el depósito a partir de soluciones de MPTMS 8 % conduce a películas menos homogéneas probablemente con mayor densidad de silano depositado en la parte externa de la película de óxido de zinc y en contacto con la solución. La porosidad de las películas también fueron evaluadas mediante nucleación de cobre luego de inmersión de las películas en solución de $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ saturada con $\text{Cu}(\text{OH})_2$ y mediante las técnicas de voltametría e impedancia electroquímica.

[1] P.R. Seré, C. Deyá, W.A. Egli, C.I. Elsner, A.R. Di Sarli, *Journal of Materials Engineering and Performance* 23 (2014) 342-348.

[2] P.R. Seré, M. Banera, W.A. Egli, C.I. Elsner, A.R. Di Sarli, C. Deyá, *International Journal of Adhesion and Adhesives* 65 (2016) 88-95.

[3] P.R. Seré, J.O. Zerbino, A. Maltz, C. Deyá, C.I. Elsner, A.R. Di Sarli, *ChemXpress* 9 (2016) 109-118.

[4] A. Garahan, L. Pilon, J. Yin, I. Saxena, *Journal of Applied Physics* 101 (2007) 014320.

CTP43.- Electrodos nanoestructurados de iridio: estudio de la respuesta electrocatalítica frente a la reacción de oxidación de hidrógeno en medio alcalino

María A. Montero, María R. Gennero de Chialvo, Abel C. Chialvo

*Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE, FIQ - UNL),
Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: montero.mariadelosangeles@gmail.com*

Se presentan aquí, resultados del estudio de la reacción de oxidación de hidrógeno sobre un electrodo nanoestructurado de iridio en solución alcalina. El electrodo, preparado por sputtering sobre un sustrato de carbón vítreo, fue caracterizado a través de las técnicas de voltametría cíclica, AFM y XPS. Luego, se evaluaron las respuestas experimentales de densidad de corriente (j) vs. potencial (n) en el rango de potencial comprendido entre $-0.015 < n/V < 0.30$, a distintas velocidades de rotación. La correlación de las curvas resultantes se llevó a cabo considerando el mecanismo de Tafel-Heyrovsky-Volmer, con una isoterma de adsorción tipo Frumkin para el intermediario adsorbido. Esto permitió la evaluación de los parámetros cinéticos de equilibrio: velocidades de reacción de equilibrio de las etapas elementales y el cubrimiento superficial de equilibrio del hidrógeno adsorbido. Los resultados obtenidos indican que, en el rango de potenciales evaluados, la reacción ocurre principalmente a través de la ruta de Tafel-Volmer con una pequeña contribución de la ruta de Heyrovsky-Volmer. Se observó una menor actividad electrocatalítica en medio básico respecto a aquella obtenida en medio ácido, la que se explica en la base de restricciones de movimiento del ión hidroxilo en la red superficial de agua que hace posible la transferencia electrónica en las etapas de Volmer y Heyrovsky.

CTP44.- Oxidación de ácido fórmico sobre electrodos nanoestructurados de Pd**Gisela C. Luque, María R. Gennero de Chialvo, Abel C. Chialvo**

Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE-FIQ-UNL),
Santiago del Estero 2809, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: luquegc@gmail.com

El estudio cinético de la reacción de electrooxidación de ácido fórmico ($HCOOH$) resulta de interés para mejorar la comprensión de los factores que gobiernan el comportamiento del ánodo en celdas de combustibles de ácido fórmico directo (DFAFC) [1]. La reacción ha sido evaluada sobre diferentes materiales electrocatalíticos y en general se acepta que la misma puede ocurrir a través de dos rutas, las que parten de una etapa común de electroadsorción del $HCOOH$ ($HCOOH \rightarrow HCOOad + H^+ + e^-$). La ruta directa se completa con: $HCOOad \rightarrow CO_2 + H^+ + e^-$. La ruta indirecta consta de las etapas: $HCOOad + e^- + H^+ \rightarrow COad + H_2O$ y $COad + H_2O \rightarrow CO_2 + 2 H^+ + 2 e^-$. Por otra parte, es bien conocido que en solución el ácido fórmico también puede ser descompuesto por catalizadores metálicos a través de dos procesos, el de deshidratación ($HCOOH \rightarrow CO + H_2O$) o bien el de deshidrogenación ($HCOOH \rightarrow CO_2 + H_2$). Por lo tanto, es importante analizar la influencia de estas reacciones espontaneas sobre la electrooxidación de $HCOOH$, la cual no ha sido investigada hasta el presente. En este contexto, el presente trabajo analiza la reacción de oxidación de $HCOOH$ sobre electrodos de paladio nanoestructurados con el objeto de verificar si tienen lugar dichas reacciones espontaneas.

La reacción favorecida sobre Pd es la deshidrogenación, que involucra el hidrógeno adsorbido (Had) como intermediario [2]. Como es bien sabido, el Pd absorbe hidrógeno (Hab), el cual puede ser detectado mediante el seguimiento del potencial a circuito abierto (OCP), a través de la definición del potencial de transición $\alpha Pd/H / \beta Pd/H$ [3]. Los electrodos de Pd fueron preparados por sputtering en atmósfera de Ar sobre un sustrato de carbón vítreo. Luego fueron caracterizados mediante microscopia AFM y voltametría cíclica. Las determinaciones electroquímicas fueron realizadas en una celda de flujo de electrolito que permite renovar el mismo a circuito eléctrico cerrado. Se utilizó un electrodo de referencia de burbuja de hidrógeno y un contraelectrodo de Pd .

Las determinaciones de OCP se realizaron en tres soluciones: H_2SO_4 0.5 M + $HCOOH$ 1 M, H_2SO_4 0.5 M saturada con H_2 y H_2SO_4 0.5 M saturada con N_2 . Partiendo siempre de esta última para asegurar condiciones iniciales idénticas, se aplicó un potencial de 1 V, se realizó el cambio de solución a circuito cerrado y luego se abrió, registrandose la variación del potencial durante 2400 segundos. En las dos primeras soluciones se observó una respuesta similar, con la zona de transición de los hidruros de Pd . De este modo se comprobó que durante la oxidación de $HCOOH$ se produce la adsorción y posterior absorción del hidrógeno, por lo que la primera etapa de la reacción sería: $HCOOH \rightarrow HCOOad + Had$

También se realizaron experiencias de stripping voltamétrico, en las que no se detecta la presencia de $HCOOad$. Por lo tanto se considera que esta especie se descompone rápidamente a: $HCOOad \rightarrow CO_2 + Had$. De este modo, la corriente de electrooxidación de $HCOOH$ en Pd corresponde a la oxidación del Had , producido por la adsorción disociativa espontanea del $HCOOH$, a través de la etapa de Tafel: $Had \rightarrow H^+ + e^-$.

A partir de estos resultados se propuso un mecanismo de reacción para la electrooxidación de ácido fórmico sobre paladio.

[1] N.V. Rees, R.G. Compton, *Journal of Solid State Electrochemistry* 15 (2011) 2095-2100.

[2] Z. Wang, Y. Ping *et al.*, Q. Jiang, *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 4850-4856.

[3] M.S. Rau, P.M. Quaino *et al.*, *Electrochemistry Communications* 10 (2008) 208-212.

CTP45.- Estudio de la reacción de oxidación de hidrógeno sobre superficies policristalinas y películas nanoestructuras de platino mediante microscopia electroquímica de barrido

Mariela A. Brites-Helú, José L. Fernández

*Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE),
Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: marielabrites@hotmail.com*

El microscopio electroquímico de barrido (SECM) se ha establecido como una herramienta versátil para el estudio de numerosos procesos superficiales [1] en áreas como corrosión, catálisis homogénea y heterogéneas, sistemas biológicos, entre otros. Específicamente constituye una poderosa técnica electroquímica para el análisis de los mecanismos de reacción de reacciones electrocatalizadas [1] y del efecto del estado (morfología, composición, *etc.*) de la superficie electródica sobre la cinética. En el presente trabajo se desarrolla el estudio teórico-experimental de la reacción de oxidación de hidrógeno (*hor*) utilizando el SECM en modo “*feedback*”. La ecuación propuesta para llevar a cabo el análisis cinético de las dependencias I_T (corriente del tip) vs. E_S (sobrepotencial del sustrato) y d (distancia tip-sustrato) tiene en cuenta las contribuciones asociadas a una celda de capa delgada, así como el mecanismo completo de Tafel-Heyrosky-Volmer para la *hor*. El dominio de condiciones en las que esta ecuación reproduce exactamente las respuestas SECM se determina contrastando las dependencias calculadas $I_T(E_S, d)$ con curvas simuladas obtenidas por método numérico variando los parámetros cinéticos y geométricos del sistema y con los datos experimentales. Se observa que en sustratos continuos, los procesos de electroadsorción y difusión superficial de los H_{UPD} generan un pico en la dependencia $I_T(E_S)$ cercano a $E_S > 0$ V vs. R_{HE} que se solapa con la respuesta tipo Butler-Volmer de la *hor*, impidiendo la correcta determinación de los parámetros cinéticos. Por otro lado, las respuestas $I_T(E_S)$ obtenidas sobre películas nanoestructuradas soportadas están libres de estos procesos paralelos y permiten una apropiada correlación ya que la naturaleza discontinua de la superficie, formada por dominios aislados, evita el intercambio y la difusión de H_{UPD} . En estos casos, la ecuación desarrollada reproduce con buena precisión el comportamiento experimental, por lo que se la propone como una herramienta para la aplicación del SECM al análisis cinético y mecanísticos de reacciones electrocatalizadas que, como la *hor*, presentan múltiples etapas elementales.

[1] A.J. Bard, M.V. Mirkin (Eds.), *Scanning Electrochemical Microscopy*, 2da. Ed., CRC Press, Boca Raton, USA, 2012.

CTP46.- Estudio teórico del mecanismo de oxidación de metanol sobre Au/TiO_2

Gustavo D. Belletti,¹ Sebastián Collins,² Paola Quaino¹

1.- PRELINE (FIQ-UNL), Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

2.- Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC, CONICET-UNL),

Güemes 3450, S3000GLN Santa Fe, Argentina

Email: gustavo.belletti@santafe-conicet.gov.ar

El mecanismo de reacción de combustión de metanol sobre un catalizador que presenta nanopartículas de Au depositadas en superficies (110) de dióxido de titanio (Au/TiO_2) ha sido investigado. Para ello se realizaron simulaciones basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), donde inicialmente se analizaron la geometría, estabilidad y frecuencias vibracionales de posibles especies superficiales e intermediarias de reacción.

A continuación, un mecanismo de oxidación completa del metanol es propuesto sobre las regiones cercanas a interfaces Au/TiO_2 . Se considera así que solamente la región del soporte cercana a la partícula metálica es activa durante la reacción. Los caminos de reacción han sido determinados, incluyendo la geometría y la energética de los estados intermediarios de reacción y las barreras de energía de activación entre ellas. Estos fueron analizados por medio de los métodos Dimer y Nudge Elastic Band (NEB). Nuestros resultados muestran que la descomposición de formiato es la etapa de reacción más desfavorecida energéticamente en la oxidación. Finalmente, se realiza una comparación con resultados experimentales.

CTP47.- Fisicoquímica de aditivos modelo de lubricación límite sobre superficies de cobre

Sebastián Carrera,¹ Marcelo Nazzarro,^{1,2} Rolando Belardinelli,^{1,2}
Nélida Peruchena,³ Octavio Furlong^{1,2}

1.- INFAP/CONICET, Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina

2.- Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis,
Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina

3.- IQUIBA-NEA (UNNE-CONICET), Avenida Libertad 5460, 3400 Corrientes, Argentina

Email: ojfurlong@unsl.edu.ar

Debido al importante consumo energético involucrado en el funcionamiento de sistemas que involucran contactos deslizantes de cobre, como ser su aplicación directa en motores eléctricos, la optimización de estos sistemas es fundamental para reducir su consumo y prolongar su vida útil, en donde los fenómenos tribológicos juegan un rol principal. Por lo anterior, el objetivo de este trabajo es utilizar estrategias de la ciencia de superficies para explorar a nivel fundamental la química de superficies de potenciales compuestos como aditivos de lubricación sobre contactos deslizantes de cobre. Con esta finalidad se pretende analizar la potencial acción lubricante de aditivos de lubricación modelo a base de azufre [1,2] y la influencia de óxidos superficiales (óxidos de cobre nativos) sobre la misma.

El desarrollo de este trabajo se realiza principalmente en condiciones de ultra alto vacío. El pre- y post-análisis de las superficies es llevado a cabo mediante el uso de la espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS, X-Ray Photoelectron Spectroscopy) [3]. La elucidación de los mecanismos de reacción se lleva a cabo mediante experimentos de desorción térmica programada (DTP) y la recolección de espectros XPS en función de la temperatura.

Los resultados obtenidos hasta el momento muestran diferencias en la fisicoquímica de superficies en relación a la presencia o ausencia de óxidos superficiales, diferencias que podrían ser decisivas al momento de seleccionar un lubricante apropiado para este tipo de sistemas. De los resultados obtenidos se espera poder contribuir con el diseño molecular de aditivos de lubricación para este tipo de sistemas mediante el estudio y comprensión de su química de superficie.

[1] O.J. Furlong, B.P. Miller, Z. Li, J. Walker, L. Burkholder, W.T. Tysoe, *Langmuir* 26 (2010) 16375-16380.

[2] H. Adams, B.P. Miller, P.V. Kotvis, O.J. Furlong, A. Martini, W.T. Tysoe, *Tribology Letters* 62 (2016) 12.

[3] S. Carrera, M. Nazzarro, O.J. Furlong, *ALDEQ* (2015) 38.

CTP48.- Análisis cinético de reacciones de electrodo sobre superficies heterogéneas en reactividad mediante microscopia electroquímica de barrido

**Mariela A. Brites-Helú,¹ María F. Stragliotto,² Sergio A. Dassie,²
Carla E. Giacomelli,² José L. Fernández¹**

1.- Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE, FIQ-UNL),
Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

2.- Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC, CONICET-UNC),
Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina

Email: jlfernan@fiq.unl.edu.ar

En diversos procesos electroquímicos es usual emplear electrodos cuyas superficies están compuestas por dominios con actividades electrocatalíticas diferentes. A modo de ejemplo pueden mencionarse los típicos electrodos usados en celdas de combustible donde nanopartículas del material activo (por ejm. *Pt*) están dispersas sobre un material conductor considerado inerte (por ejm. grafito), y los electrodos modificados con monocapas autoensambladas (*SAM's*) funcionalizadas utilizados como sensores electroquímicos. A la hora de analizar este tipo de electrodos, por lo general las técnicas electroquímicas permiten obtener respuestas de los mismos que convolucionan las contribuciones de los diferentes dominios presentes en la superficie. En particular, si bien la microscopia electroquímica de barrido (SECM) clásica permite discernir heterogeneidades de actividad en el orden del micrón, no es capaz de resolverlas a escalas nanométricas. De ahí que es necesario disponer de un formalismo que permita desacoplar las respuestas de las diferentes regiones activas. En este contexto, este trabajo presenta un modelo para el análisis de las respuestas SECM corriente vs. potencial aplicable a superficies heterogéneas, basado en el desarrollo de las ecuaciones cinéticas y de transporte de masa verificadas en una celda de capa delgada. El modelo fue aplicado exitosamente para el análisis de dos sistemas asociados a los ejemplos mencionados previamente, es decir el estudio de la reacción de oxidación de hidrógeno sobre ensambles de nanopartículas metálicas sobre *HOPG*, y el análisis de la transferencia de electrones entre grupos redox anclados a *SAM's* y un mediador en solución.

**CTP49.- Degradación superficial de películas de composites
PDMS-MWCNT por reacción UV con $Br_2(g)$**

Nicolás Cabrera,^{1,2} Mariano M. Ruiz,¹ Leonardo Lizarraga,³
Mirta Fascio,^{4,5} Norma D'Accorso,^{4,5} Martín Negri^{1,2}

1.- Instituto de Química Física de Materiales, Ambiente y Energía (INQUIMAE, CONICET-UBA),
Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

2.- Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y
Naturales, UBA, Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

3.- Centro de Investigaciones en Bionanociencias (CIBION, CONICET),
Godoy Cruz 2390, C1425FQD CABA, Argentina

4.- Centro de Investigación en Hidratos de Carbono (CIHIDECAR, CONICET-UBA),
Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

5.- Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA,
Ciudad Universitaria, Pabellón 2, C1428EGH CABA, Argentina

Email: rmn@qi.fcen.uba.ar

La motivación del presente trabajo está en el interés por obtener películas poliméricas sobre sustrato de vidrio, por ejemplo basadas en polidimetilsiloxano (PDMS), para modificar la adsorción de microorganismos sobre el sustrato. La incorporación de nanomateriales al PDMS modifica la rugosidad de las películas que se forman sobre vidrio, alterando la formación de biopelículas. En este estudio se dispersaron nanotubos de carbono (MWCNT) en PDMS no entrecruzado. A dicho medio se incorporó un agente entrecruzante (“cross-linker”), disolviendo en tolueno hasta obtener un sistema de viscosidad apropiada para fabricar películas sobre vidrio mediante “spin-coating”. Finalmente las películas se curaron térmicamente. En algunos casos se incorporaron, junto con los MWCNT, ferritas de cobalto ($CoFe_2O_4$) las cuales son nanopartículas magnéticas (NP's) de 20 nm de tamaño, sintetizadas mediante co-precipitación ácido-base. Los composites PDMS-MWCNT-NP's fueron curados en presencia de un campo magnético uniforme (0.1 T) perpendicular al sustrato, con el fin de inducir estructuración en la dirección del campo. Una vez preparadas, las películas fueron expuestas a vapores de bromo, $Br_2(g)$, y luego irradiadas empleando una lámpara de mercurio. Las películas fueron estudiadas mediante profilometría, microscopia de fuerza atómica (AFM), microscopia de fuerza magnética (MFM), SEM y FTIR. Los espesores obtenidos fueron de entre 20 y 50 μm . Por SEM se pudo observar la presencia de los MWCNT. En los composites que contienen NP's magnéticas y curadas en presencia de campos magnéticos, se observaron aglomerados de NP's rodeados por MWCNT. El análisis mediante SEM, AFM y MFM indica que prácticamente todos las NP's se aglomeran con los MWCNT. Resultados preliminares por AFM y MFM sugieren que estos sistemas presentan mayor rugosidad superficial que aquellos en donde no hay NP's.

Al adsorber Br_2 e irradiar con radiación UV se observó por FTIR la desaparición total de la banda a 910 cm^{-1} , asociada a la vibración de los grupos vinilos terminales de las cadenas de PDMS. Esto sugiere que efectivamente se produjo el ataque de los radicales Br (generados al irradiar) sobre los doble enlaces terminales. Cabe destacar que si se impregna la superficie con bromo líquido y se la irradia, se observa a la vista la destrucción de la película. En el caso de utilizar $Br_2(g)$ también se observan cambios visuales en la rugosidad superficial de las películas luego de irradiar, aunque sin destrucción de las mismas. En conclusión, la incorporación de nanomateriales genera cambios de rugosidad superficial, los cuales parecen aumentar al realizar el ataque con bromo. Este método (exposición a vapores de bromo seguido de ataque radicalario inducido por UV) parece altamente promisorio para inducir cambios más importantes en la rugosidad superficial.

CTP50.- Estudio DFT de la influencia del oxígeno coadsorbido en la formación de *OH* sobre *Fe*(100)

José J. Arroyo-Gómez, Sebastián Amaya-Roncancio, Daniel H. Linares, Karim Sapag

Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET-UNSL, Avenida Ejército de los Andes 950,
Bloque II - 2° Piso, 5700 San Luis, Argentina
Email: josej.arroyog@gmail.com

En este trabajo se realizó el estudio de la influencia del oxígeno coadsorbido en la formación de *OH* sobre la superficie *Fe*(100). Se utilizó una celda de tamaño (2×3), en la cual los sitios “*hollow*” fueron ocupados con oxígenos. La proporción de oxígeno adsorbido se varió desde 1/6 hasta 2/3 MC. El camino de reacción encontrado para la formación del *OH* superficial mostró que el sitio “*bridge*” es el más indicado para la adsorción de esta especie. Adicionalmente, el mecanismo de formación de *OH* en presencia de los diferentes cubrimientos de oxígeno, muestra que la energía de activación disminuye a medida que aumenta el recubrimiento. Finalmente, se realizó un modelo cinético para estudiar el comportamiento de la formación de *OH* en función de la temperatura, encontrando los valores de temperatura en los que se favorece la formación de esta especie.

CTP51.- Descomposición de hexacarbonilo de molibdeno sobre superficies de cobre. Estudio mediante TPD y XPS**Andrés A. García-Blanco,^{1,2} Octavio Furlong,^{1,2} Darío Stacchiola,³ Marcelo Nazzarro^{1,2}***1.- INFAP/CONICET, Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina**2.- Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis,
Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina**3.- Chemistry Department, Brookhaven National Laboratory, NY 11973 Upton, USA
Email: nazzarro@unsl.edu.ar*

Los carburos de metales de transición son compuestos de gran interés en el área de la catálisis heterogénea, puesto que presentan una reactividad similar a la de metales preciosos como el platino, y a su vez un con costo menor y una resistencia térmica elevada. En años recientes, varios carburos, especialmente el carburo de molibdeno, han sido estudiados en relación a la reacción de hidrogenación de CO_2 , con el fin de que este gas de efecto invernadero pueda transformarse en combustibles útiles (alcoholes, monóxido de carbono) [1,2].

Por otro lado, el uso de catalizadores inversos, como $\text{CeO}_x/\text{Cu}(111)$ y $\text{CeO}_x/\text{Au}(111)$, ha demostrado ser una importante aproximación desde la ciencia de superficies para estudiar la reactividad de metales y de la interfaz metal-óxido con respecto a reacciones de catálisis heterogénea [3]. El hexacarbonilo de molibdeno ($\text{Mo}(\text{CO})_6$), depositado sobre superficies de Au y películas delgadas de Al_2O_3 , ha sido empleado para la obtención de carburos de molibdeno sobre las mencionadas superficies [4], por lo cual, podría ser un potencial método de obtención de catalizadores modelo.

En este trabajo se estudió la deposición de $\text{Mo}(\text{CO})_6$ sobre un policristal de cobre en condiciones de ultra alto vacío, con la finalidad de analizar la descomposición de este compuesto órgano-metálico sobre dicha superficie. Para ello se realizaron experimentos de desorción térmica programada (TPD) de $\text{Mo}(\text{CO})_6$ sobre cobre desde ~ 90 K a diferentes cubrimientos iniciales. Adicionalmente, por medio de XPS, se analizó el tipo de especies presentes en la superficie tanto a baja temperatura como después del tratamiento térmico. Por otra parte, se analizó el comportamiento del $\text{Mo}(\text{CO})_6$ al ser expuesto a la superficie a diferentes temperaturas, evidenciando cambios importantes en las especies formadas sobre la superficie.

[1] J.A. Rodríguez, P. Liu, D.J. Stacchiola, S.D. Senanayake, M.G. White, J.G. Chen, *ACS Catalysis* 5 (2015) 6696-6706.

[2] M.D. Porosoff, X. Yang, J.A. Boscoboinik, J.G. Chen, *Angewandte Chemie* 126 (2014) 6823-6827.

[3] S.D. Senanayake, D.J. Stacchiola, J.A. Rodríguez, *Accounts of Chemical Research* 46 (2013) 1702-1711.

[4] M. Kaltchev, W.T. Tysoe, *Journal of Catalysis* 196 (2000) 40-45.

CTP52.- Caracterización de la adsorción de C, O, CO y CO₂ sobre Cu(110)Giulia N. Seminara,¹ Alejandra E. Martínez^{1,2}

1.- Instituto de Física Rosario (IFIR, CONICET-UNR), Ocampo y Esmeralda, 2000 Rosario, Argentina

2.- Departamento de Física (ECEN-FCEIA-UNR), Avda. C. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina

Email: seminara@ifir-conicet.gov.ar

Si bien, en la industria química, el CO₂ es considerado como la materia prima de un número importante de reacciones, el interés en el estudio de las reacciones que involucran al CO₂ se ha incrementado considerablemente en las últimas décadas debido a la relación directa que existe entre la emisión antropogénica de CO₂, el calentamiento global y el efecto invernadero [1-2].

En este contexto, los procesos en los que participa el CO₂ y que dan lugar a otros compuestos basados en C, tales como la reacciones de “*water gas shift*” directa e inversa, reformado de metano, reacción de Sabatier, *etc.*, constituyen una alternativa importante en la tarea de atenuar y revertir los efectos adversos asociados a esta especie.

La catálisis heterogénea es una de las alternativas que han sido planteadas para llevar a cabo estos procesos [3]. En sistemas heterogéneos, tal como el sólido-gas, estas reacciones tienen lugar precisamente en la interfase. La superficie del sólido aporta, en este caso, un lugar donde depositar e inmovilizar la sustancia catalizadora.

Uno de los obstáculos hallados en su aplicación práctica es la rápida desactivación de la superficie catalizadora, principalmente por coquefacción. Los catalizadores basados en metales nobles han demostrado ser menos sensibles a esto que aquellos basados en metales de transición, pero presentan la desventaja de tener un costo elevado y una disponibilidad limitada. En consecuencia, los catalizadores basados en metales de transición, de menor costo, tales como el Cu, se tornan una opción viable.

En el presente trabajo nos proponemos caracterizar la interacción de C, O, CO y CO₂ con una superficie metálica de Cu(110), a fin de relevar las principales características de dicha interacción: sitios favorables de adsorción, su energética, la geometría asociada, estabilidad y posibles barreras de activación. La descripción teórica se realizará a partir de cálculos basados en la Teoría del Funcional Densidad (DFT), utilizando el código VASP.

[1] U. Burghaus, *Progress in Surface Science* 89 (2014) 161-217.

[2] L. Shi, G. Yang, K. Tao, Y. Yoneyama, Y. Tan, N. Tsubaki, *Accounts of Chemical Research* 46 (2013) 1838-1847.

[3] R.W. Dorner, D.R. Hardy, F.W. Williams, H.D. Willauer, *Energy and Environmental Science* 3 (2010) 884-890.

CTP53.- Estudio teórico de la reconstrucción tipo “missing row” (MR) de la cara 110 de Ir, Pt y Au**Iván F. Peludhero,¹ Heriberto F. Busnengo^{1,2}***1.- Instituto de Física Rosario (IFIR, CONICET-UNR), Ocampo y Esmeralda, 2000 Rosario, Argentina**2.- Departamento de Física (ECEN-FCEIA-UNR), Avda. C. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina**Email: peludhero@ifir-conicet.gov.ar*

Una de las motivaciones más importantes de la ciencia de superficies es comprender los mecanismos de reacciones químicas en catálisis heterogénea, con la esperanza de que tal conocimiento permita vislumbrar nuevos catalizadores, más eficientes [1]. Una de estas reacciones catalíticas de gran relevancia es el reformado de gas natural que se utiliza para producir H_2 a nivel industrial a partir de CH_4 y H_2O , utilizando catalizadores basados en Ni . En este caso, la etapa limitante de la velocidad es la disociación del CH_4 . Esto ha motivado un gran número de estudios experimentales, los cuales han establecido que, en general, la disociación de CH_4 es más favorable en las caras menos compactas de metales como Ni , Pt e Ir .

Una dificultad que presenta la simulación de procesos sobre caras abiertas de metales de transición es que suelen presentar reestructuraciones espontáneas, que conllevan un cambio de simetría respecto a la superficie ideal. Esto sucede, en particular, en metales de transición tardíos que se caracterizan por una energía de cohesión relativamente baja, caso del Ir , Pt y Au , cuyas superficies 110 presentan reconstrucciones tipo MR. En este tipo de reconstrucción, existe al menos una fila faltante de átomos [2].

Por otro lado, es necesaria una descripción teórica de los efectos de la temperatura sobre la superficie, ya que las distorsiones térmicas de la misma pueden aumentar su reactividad local. También es interesante evaluar si a una dada T , estructuras superficiales más abiertas, como la 110 de la FCC, generan desplazamientos más pronunciados de los átomos de la superficie, respecto a sus posiciones de equilibrio, que en el caso de superficies más compactas como la 111 de la FCC.

En este trabajo se realizó un estudio, a partir de cálculos basados en la teoría de la funcional densidad (DFT), de la estabilidad relativa de diversas superficies de bajo índice de Miller de Ir , Pt y Au , incluyendo estructuras reconstruidas tipo MR en el caso de las caras 110. Se evaluaron energías de superficie con diferentes densidades de filas faltantes con el fin de determinar en qué medida la DFT es capaz de dar cuenta de las estabilidades relativas de las estructuras observadas experimentalmente en cada caso. Se realizaron simulaciones de dinámica molecular canónica para comparar la movilidad de los átomos superficiales en posibles estructuras tipo MR, con las obtenidas en la estructura no reconstruida y con la cara más compacta 111. Un estudio de este tipo es el primer paso para modelizar la reactividad de estas superficies en cuanto a la adsorción disociativa de CH_4 , de la que existen resultados experimentales con técnicas de haces moleculares supersónicos [3,4] que aún no han sido contrastados e interpretados a partir de simulaciones dinámicas.

[1] J. H. Larsen, I. Chorkendorff, *Surface Science Report* 35 (1999) 163-222.

[2] R. Koch, M. Borbonus, O. Haase, K.H. Rieder, *Applied Physics A* 55 (1992) 417-429.

[3] R. Beck, A. Utz, *Springer Series in Surface Science* 50 (2013) 179-212.

[4] D.C. Seets, C.T. Reeves, B.A. Ferguson, M.C. Wheeler, C.B. Mullins, *Journal of Chemical Physics* 107 (1997) 10229-10241.

**CTP54.- Caracterización superficial de películas de
redes metal-orgánicas mediante AFM y XPS****Rocío Papurello,¹ Juan M. Zamaro,¹ José L. Fernández,² Eduardo Miró¹**

1.- Laboratorio de Fisicoquímica, Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica, INCAPE
(FIQ, UNL-CONICET), Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina

2.- Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica, PRELINE (FIQ, UNL),
Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina
Email: rociopapurello@gmail.com

El estudio de los “*metal-organic frameworks*” (MOF's) se ha extendido en los últimos años debido a sus características inherentes tales como una elevada superficie específica y estructuras de poros ordenadas. Esto los posiciona como materiales con potencial aplicación como adsorbentes, soportes de catalizadores, entre otras. Consisten en clusters inorgánicos enlazados mediante unidades orgánicas en arreglos tridimensionales. Resulta de interés sintetizarlos en forma de películas sobre sustratos para emplearlos como soportes de especies activas.

El objetivo de este trabajo es analizar la microestructura de los sustratos metálicos y caracterizar películas de ZIF-8 funcionalizadas y evaluadas en una reacción en fase gas. Como sustratos se emplearon láminas de cobre electrolítico en las que se moldearon microcanales paralelos. El crecimiento de las películas se efectuó mediante síntesis solvotérmica directa (T: 120 °C, t: 10 horas). La adición de nanopartículas de Ag sobre las películas del MOF se efectuó mediante impregnación a humedad incipiente (AgNO₃, etanol) seguido de reducción mediante UV. El análisis superficial del sustrato y películas se efectuó por Microscopia de Fuerza Atómica (AFM) con un equipo Agilent 5400 (“Keysight Technologies, USA”) con cantiléver de Si en modo “tapping”. La composición superficial se examinó mediante Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X (XPS) con un equipo multitécnica SPECS. Estudios previos de crecimientos sobre sustratos planos (SP) de cobre determinaron que mediante síntesis directa no se desarrolla la película del MOF. Por el contrario, en los sustratos microplegados (SM) se obtuvo una película continua y uniforme. Mediante AFM se obtuvieron los perfiles topográficos de ambos sustratos. El SP muestra una nanoestructura de grano típica de electrodeósitos de cobre propio del método de producción de estos materiales. Sin embargo el SM presenta un tamaño de grano mucho mas fino, probablemente debido a la compresión que sufre durante el proceso de plegado. Esta nanorugosidad provee una alta densidad de sitios de nucleación que permite el desarrollo de la película. En el perfil del microcanal tratado solvotérmicamente por 1 hora, se observaron formaciones nanométricas que mediante imágenes de contraste de fase, se determinó que poseen una naturaleza química diferente a la del sustrato, en correspondencia con pequeños núcleos de ZIF-8. Se evaluó mediante XPS la composición elemental de las películas funcionalizadas con plata antes y luego de la evaluación catalítica. En ambos casos se detectó cobre superficial en estado de oxidación +1 de acuerdo a los valores de energía de las transiciones Cu2p y Cu_{LMM} obtenidas. Estas especies provienen de la disolución parcial del sustrato durante la síntesis. Por otra parte, el parámetro Auger calculado a partir de las transiciones Ag_{MNN} confirman la presencia de Ag metálica en las dos muestras.

Los estudios realizados permitieron determinar que el tratamiento de microplegado promueve la nucleación de los cristales y que la microestructura superficial juega un rol fundamental en el crecimiento de la película. El análisis XPS demostró la presencia de Cu(I) y Ag⁰ en las películas impregnadas y evaluadas en reacción.

CTP55.- Caracterización de las propiedades superficiales de aleaciones ternarias de *Pd* resistentes al envenenamiento con H_2S **Ana M. Tarditi, Laura M. Cornaglia***Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (FIQ, UNL-CONICET),**Santiago del Estero 2829, S3000AOM Santa Fe, Argentina**Email: atarditi@fiq.unl.edu.ar*

El paladio presenta una elevada solubilidad, permeabilidad y selectividad hacia hidrógeno, presentándose como una de las opciones a ser aplicadas como membranas para purificación de hidrógeno a partir de diferentes procesos. El mecanismo de permeación a través de este tipo de membranas es el de solución-difusión planteándose las siguientes etapas: (i) adsorción molecular de hidrógeno en la superficie, (ii) disociación molecular, (iii) difusión atómica a través de la aleación, (iv) recombinación, y (v) desorción de H_2 del lado de permeado. La presencia de gases como CO , CO_2 y H_2S en las corrientes de alimentación pueden inhibir la permeación de hidrógeno debido a un bloqueo de los sitios para la adsorción-disociativa de H_2 . Teniendo en cuenta que la composición influye en los fenómenos que ocurren en la superficie, el estudio de las propiedades superficiales y la determinación de su dependencia con las condiciones de operación es necesario para una mejor comprensión de los fenómenos involucrados en la permeación.

En este trabajo se presenta un estudio de las propiedades superficiales de aleaciones ternarias $PdAgAu$, $PdCuAg$ y $PdCuAu$. Las muestras fueron sintetizadas por deposición auto-catalítica secuencial en la superficie de soportes porosos de acero inoxidable seguidas de tratamiento térmico en flujo de hidrógeno para formación de la aleación. Las muestras fueron evaluadas mediante un conjunto de técnicas antes y después de ser expuestas a diferentes corrientes de gases. La composición volumétrica y la homogeneidad de la aleación en espesor fue determinada mediante EDS. Mediante XPS se determinó la concentración en la zona cercana a la superficie y la composición en la capa más externa mediante LEIS.

Por otro lado, se estudió el efecto de la presencia de gases como H_2S en las propiedades superficiales de las aleaciones ternarias $PdAgAu$ y $PdCuAu$. El efecto de la contaminación superficial con azufre, el cual no fue detectado por EDS ni DRX, se analizó mediante bombardeo con Ar^+ seguido por XPS. Los perfiles de concentración de las muestras $PdAgAu$ mostraron una débil señal de S en la superficie desapareciendo con el tiempo de bombardeo a una profundidad de ~ 10 nm. Los resultados demuestran que la adición de Au imparte resistencia a la corrosión a la aleación binaria $PdAg$.

En el caso de las muestras de $PdCuAu$ se observó un bajo contenido de azufre en la superficie luego de ser expuestas a corrientes de H_2S . El estudio en profundidad mediante bombardeo con Ar^+ -XPS, luego del tratamiento de recuperación en hidrógeno a $400^\circ C/48$ horas, seguido de tratamiento a $500^\circ C/24$ horas, mostró un contenido de S menor al 3 %, en concordancia con la recuperación del flujo de hidrógeno. Los resultados obtenidos sugieren que la aleación $PdCuAu$ puede ser un material prometedor para ser aplicado para la purificación de hidrógeno. La presencia de Cu en la última capa atómica, puede contribuir a la alta resistencia a la corrosión.

**CTP56.- Modificación de superficies conductoras
con sistemas basados en grafeno**

**Fabricio Mayorga,¹ Maximiliano Merlo,² Sofia Raviolo,²
Henry Núñez,² Daniel Brusa,³ Noelia Bajales^{2,4}**

1.- Facultad de Ciencias Químicas (FCQ, UNC), Haya de la Torre y Medina Allende,
Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina

2.- Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FaMAF, UNC),
Medina Allende S/N, Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina

3.- Centro de Investigación y Transferencia en Metrología (CEMETRO, UTN),
Armada Argentina 4050, X5016DIP Córdoba, Argentina

4.- Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG, CONICET-UNC), Medina Allende S/N,
Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina

Email: bajalesluna@famaf.unc.edu.ar

Los alótropos de baja dimensionalidad del carbono han llamado la atención en las últimas décadas debido al descubrimiento de sus excepcionales propiedades electrónicas, ópticas, mecánicas, térmicas, magnéticas y electrocatalíticas. Uno de los alótropos más estudiados es el grafeno, el cual se puede definir como un material bidimensional conformado por enlaces de átomos de carbono en estructuras hexagonales planas [1]. Existen numerosos métodos para sintetizar grafeno, siendo la ruta química una herramienta versátil que permite obtener una familia de compuestos basados en grafeno con propiedades antagónicas. De esta manera, la oxidación de capas de grafito da lugar al óxido de grafeno (*GO*), mientras que la reducción del *GO* permite obtener distintos grados de óxido de grafeno reducido (*rGO*). El *GO* es un material hidrofílico y de carácter aislante, en tanto el *rGO* es hidrofóbico y de carácter conductor. Así, el recubrimiento de superficies con algunos de estos sistemas basados en grafeno permite modular las propiedades electroquímicas y eléctricas de las mismas [2].

En este trabajo se muestran resultados sobre la caracterización estructural, electroquímica y eléctrica de superficies conductoras (*AuPd*), modificadas con láminas delgadas de *GO* y *rGO*. El efecto en la morfología de las superficies funcionalizadas con *GO* y *rGO* es monitoreada por medio de SEM y AFM. La caracterización electroquímica evidencia un fuerte cambio en las propiedades conductoras del blanco de *AuPd*, mientras que la caracterización eléctrica en función de la temperatura (10-290 K) muestra que un delgado recubrimiento de *GO* (*rGO*) altera el comportamiento de la resistencia eléctrica esperada para metales.

[1] A. Böttcher, D. Löffler, N. Bajales, S. Ulas, R. Machatschek, S. Malik, P. Brenner, M.M. Kappes, *Nanotechnology* 23 (2012) 415302.

[2] Sh. Liu, T.H. Zeng, M. Hofmann, E. Burcombe, J. Wei, R. Jiang, J. Kong, Y. Chen, *ACS Nano* 5 (2011) 6971.

***Biomoléculas sobre superficies e
interfaces de interés biológico***

CTP57.- Modificación superficial de biovidrio 58S con ácido gálico

Joaquín E. Martínez-Porcel,¹ Valeria B. Arce,² Paula Gomes,³
Celso A. Bertrán,³ Daniel O. Mártire¹

1.- Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), UNLP, La Plata, Argentina

2.- Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp), (CONICET La Plata-CIC), Gonnet, Buenos Aires, Argentina

3.- Departamento de Fisicoquímica, Instituto de Química, Universidad de Campinas-UNICAMP,
Campinas/SP, Brasil

Email: jmartineziporcel@inifta.unlp.edu.ar

Introducción: los biovidrios 58S (BV), compuestos por 60 % mol SiO_2 , 36 % mol CaO y 4 % mol P_2O_5 [1], han sido ampliamente usados en clínica para la integración y regeneración del tejido óseo. Cuando se implantan en el cuerpo humano, pueden proveer un sustrato adhesivo adecuado para el anclaje celular y la colonización bacteriana pudiendo traer elevados riesgos de infección. De manera de reducir la incidencia de infecciones posoperatorias, se han investigado materiales modificados que presentan actividad antibacteriana. Por otra parte, el ácido gálico (GA) es un tipo de polifenol que presentan cierta actividad antibacteriana. Estudios recientes muestran que los polifenoles pueden modificar la virulencia bacteriana, movilidad y la formación de biopelículas [2]. En otros estudios se ha visto que el GA inmovilizado sobre la superficie de nanopartículas de Au presenta actividad bactericida que depende de la cantidad de GA usado en la síntesis, aunque, el GA por sí mismo no presenta actividad bactericida significativa para estas mismas concentraciones [3].

Experimental: inicialmente los biovidrios 58S fueron modificados con APTES para permitir la unión química del ácido gálico mediante la formación de un enlace amida. Para la incorporación del GA se emplearon dos métodos:

1.- Modificación en tolueno con agentes activadores: se utilizaron N,N'-diciclohexilcarbodiimida (DCC) y N-hidroxisuccinimida como agentes activadores para favorecer la formación del enlace peptídico, y tolueno como solvente para la reacción.

2.- Modificación en agua sin agentes activadores: el BV-APTES se puso en contacto con una solución acuosa de GA.

Resultados: para evidenciar la incorporación del APTES y GA en el BV se tomaron espectros IR (ATR) y UV-visible. En el espectro IR para el BV-APTES-GA se observa la presencia de picos característicos de la frecuencia de estiramiento de los enlaces Si-O del BV a 795 cm^{-1} y una banda intensa en la zona de los 1000 y 1200 cm^{-1} a la que contribuyen los estiramientos de los enlaces Si-O-Si y C-N. Además, el pico del modo de estiramiento del C=O a 1632 cm^{-1} aparece con baja intensidad. Por otro lado, en el espectro UV-visible del BV-APTES-GA se observa un pico de absorción con un máximo en 255 nm aproximadamente que se corresponde con el GA.

Conclusiones: tanto los espectros IR como UV-visible sugieren que los métodos utilizados para la modificación del BV son satisfactorios, debido a la presencia de picos característicos del APTES y el GA sobre la superficie del material bioactivo, que no están presentes en el espectro del BV solo.

[1] C.A. Bertran, O.V.M. Bueno, *Key Engineering Materials* 631 (2015) 36-42.

[2] C. O'May, A. Ciobanu, H. Lam, N. Tufenkji, *Biofouling* 28 (2012) 1063-1076.

[3] S.A. Moreno-Álvarez, G.A. Martínez-Castañón, N. Niño-Martínez, J.F. Reyes-Macías, N. Patiño-Marín, J.P. Loyola-Rodríguez, F. Ruiz, *Journal of Nanoparticles Research* 12 (2010) 2741-2746.

CTP58.- Modificaciones físico-químicas superficiales de polímeros: Aplicación a sustratos de cultivos “*in-vitro*” e influencia en el metabolismo celular

**Claudia Arbeitman,¹ Gustavo Ruano,² Mariela Del Grosso,³
Hugo Ascolani,⁴ Gerardo García-Bermúdez³**

1.- Instituto de Medicina Traslacional, Trasplante y Bioingeniería (IMeTTyB, CONICET - UF),
Buenos Aires, Argentina

2.- Instituto de Física del Litoral (IFIS-Litoral, CONICET-UNL), Santa Fe, Argentina

3.- Gerencia de Area Investigaciones y Aplicaciones No Nucleares (GAIyANN), CAC-CNEA,
Buenos Aires, Argentina

4.- Gerencia Física, Laboratorio de Colisiones Atómicas, CAB-CNEA, San Carlos de Bariloche, Argentina
Email: clarbeitman@yahoo.com.ar

En el presente trabajo, se describe la aplicación de iones a altas energías para producir modificaciones físico-químicas superficiales en polímeros diversos. La caracterización de la superficie posirradiación se realizó mediante espectroscopia de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS) y espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR). Seguidamente, se estudiaron respuestas celulares de cultivos “*in-vitro*” en dichos sustratos. Los resultados obtenidos demuestran la existencia de un valor óptimo de fluencia de irradiación para los cuales se logran cultivos funcionales y metabólicamente activos. Este valor pudo correlacionarse en términos de la energía depositada por los iones y el radio químico de modificación. Asimismo, esta región de fluencias en la que se obtuvieron respuestas favorables se relaciona con una determinada morfología de la superficie en términos de la superposición de trazas, y este resultado es válido para todos los polímeros estudiados. Debido a la distribución no homogénea de los “*tracks*” iónicos, se infiere que los receptores celulares detectan de forma selectiva sectores de la superficie con diferentes grados de superposición. Esto conduce a la formación de contactos focales que difieren según las condiciones de irradiación. Los cambios en los comportamientos celulares, a ciertas fluencias, podrían explicarse -según esta perspectiva- asumiendo que las células encuentran una mejor superficie para anclarse adecuadamente resultando más favorable para la formación de lamelipodios, filopodios y a una adhesión selectiva de proteínas que conducen a haptotaxis.

Índice de Autores

Abufager P.	106	Candia A.E.	81
Aguirre A.	119	Cappellari M.V.	87
Aguirre M.A.	86	Carballo J.	89
Aguirre M.H.	77	Carrera S.	126
Albanesi E.A.	94	Castellani N.J.	51, 102
Aldao C.M.	44	Cencha L.	79
Álvarez V.A.	60	Chialvo A.C.	122, 123
Amaya-Roncancio S.	116, 129	Clavero M.	85
Anduaga L.	93	Collins S.	119, 125
Antonio-Hernández C.	79	Cometto F.	103
Arbeitman C.	138	Cornaglia L.M.	54, 112, 134
Arce M.	118	Cornette V.	47, 96
Arce V.B.	137	Coronel L.	54
Arroyo-Gómez J.J.	129	Corti H.R.	101
Ascolani H.	50, 108, 109, 138	Cristina L.J.	108
Azzaroni O.	63	D'Accorso N.	86, 128
Baigorria E.	107	Dalla-Costa B.O.	115
Bajales N.	89, 135	Dassie S.A.	127
Barth C.	43	Decolatti H.P.	115
Belardinelli R.	126	Del Grosso M.	138
Belletti G.D.	99, 105, 125	Devida J.M.	93
Bengió S.	48	Deya C.	120
Bernardi G.C.	83	Di Sarli A.R.	120
Berndt R.	106	Dittrich T.	88
Bertrán C.A.	137	Domínguez-Rivera M.	109
Bluhm H.	49	dos Santos G.J.	95
Bollero A.	27	Durantini E.	107
Bonetto F.	98, 110, 111	Elsner C.I.	120
Bonin C.J.	98	Faccio R.	26, 80, 82
Boscoboinik J.A.	24	Fadgen W.	67
Bosio G.	100	Farias E.D.	104
Brites-Helú M.A.	124, 127	Faroldi B.	112
Brunetti V.	32, 104	Fascio M.	86, 128
Brusa D.	135	Fernández J.L.	124, 127, 133
Buono C.	44	Fernández L.	87
Busnengo H.F.	132	Ferrari V.	43
Cabello A.P.	85	Ferrón J.	81, 98, 111
Cabeza G.F.	57, 75, 97, 117	Floreano L.	109
Cabrera N.	128	Forzani L.	78, 79
Calaza F.C.	49	Fregenal D.E.	83
Camarero J.	27, 37	Freund H.	49

Fuhr J.D.	50, 108, 109	Llois A.M.	43
Fungo F.	59, 87	Lobo-Checa J.	25
Furlong O.	126, 130	Lograsso T.A.	77
Ganduglia-Pirovano M.V.	43	Longinotti M.P.	101
García-Bermúdez G.	138	López R.	47, 96
García-Blanco A.A.	130	López-Corral I.	82
García-Lekue A.	77	Lorente N.	106
García-Michel E.	48	Luque G.C.	123
Gayone J.E.	50, 83, 108, 109	Luque S.E.	86
Gelman-Constantín J.	101	Machain P.	50, 109
Gennaro A.M.	78	Macor L.	88, 107
Gennero de Chialvo M.R.	122, 123	Maldonado A.S.	117
Gervaldo M.	87, 88, 107	Maltz A.	120
Giacomelli C.E.	127	Marchesini G.R.	69
Gianetti M.M.	101	Martínez A.E.	131
Giovanetti L.	58	Martínez-Porcel J.E.	137
Glukhov D.V.	99	Martínez-Velarte M.C.	77
Goldberg E.C.	90, 110	Martins-Ferreira E.H.	38
Gomes P.	137	Mártire D.O.	100, 137
Gómez-Andrade V.A.	76	Mayorga F.	135
Gómez-Marlasca F.	76	Meier L.A.	102
Gottardi S.	94	Mendoza S.M.	53
Grumelli D.	31	Merlo M.	89, 135
Gutiérrez T.J.	60	Mietta J.L.	86
Hauptmann N.	106	Milanesio M.E.	107
Hernández L.	87	Milano J.	83
Herrera F.C.	93	Miranda R.	27
Hochman E.	86	Miró E.	133
Huergo M.A.C.	58, 93	Mombrú A.	80
Ibarra M.R.	77	Montenegro B.	80
Iglesias-García A.	90	Montero M.A.	122
Irusta S.	112	Montoro S.S.	81, 111
Jiménez M.J.	75	Morales G.M.	59
Juan A.	82	Morán-Ayala L.	100
Karslioglu O.	49	Morellón L.	77
Kellogg R.M.	108	Moreno S.	58
Kern K.	103	Moreno-López J.C.	94
Koropecski R.R.	78, 79	Morgade C.I.N.	57, 97, 117
Kretz B.	77	Moro-Lagares M.	77
Lago C.D.	115	Moya S.E.	63
Levy P.	76	Múnera J.F.	54
Linares D.H.	95, 116, 129	Murgida G.E.	43
Lingenfelder M.	21, 103, 108	Muzzio N.E.	63
Lizarraga L.	128	Nazmutdinov R.R.	99

Nazzarro M.	126, 130	Ruiz M.M.	128
Negri M.	84, 86, 128	Ruiz P.	112
Neyertz C.A.	85	Saleh-Medina L.M.	84, 86
Núñez H.	89, 135	Salvarezza R.C.	58
Olbrich R.	43	Sapag K.	116, 129
Otero L.	87, 88, 107	Schipani F.	44
Pallarola D.	93	Schulte E.	118
Papurello R.	133	Segovia P.	48
Pasquale M.A.	63	Seminara G.N.	131
Passeggi (h) M.C.G.	81, 104	Serrate D.	77
Peiretti L.F.	52, 105, 119	Silva C.	111
Peludhero I.F.	132	Solís C.	88, 107
Perna P.	27	Sosa M.D.	84
Peruchena N.	126	Stacchiola D.	130
Píriz S.	82	Sterrer M.	49
Pomiro F.	81	Stöhr M.	94
Ponce M.A.	44	Stragliotto M.F.	127
Pozzi G.	87	Suárez M.B.	88
Quaino P.	52, 99, 105, 118, 119, 125	Tacca M.	110
Querini C.A.	115	Tarditi A.M.	54, 134
Quintero-Riascos V.	98	Terán F.J.	27
Ramírez A.J.	95	Tielens F.	52
Ramírez G.A.	83	Torres-Leal R.G.	68
Ramírez-Cuesta A.J.	23	Ulla M.A.	85
Ramos C.	78	Urteaga R.	79
Ramos S.B.	117	Van der Meijden M.W.	108
Rappich J.	88	Vasallo-Brigneti E.	78
Raviolo S.	135	Verdini A.	109
Reichling M.	43	Vericat C.	58
Requejo F.G.	58, 93	Vidal R.A.	98, 111
Ribetto F.	89	Vignatti Ch.	57
Riedemann T.M.	77	Vobornik I.	48
Robino L.	109	Vogt L.	119
Robles R.	106	Vozer-Felisberto M.	89
Rodríguez L.M.	83, 108, 109	Walczak L.	48
Rodríguez S.J.	94	Yelpo V.	47, 96
Roncaroli F.	76	Zamaro J.M.	85, 133
Rossi A.C.	51, 102	Zensich M.A.	59
Ruano G.	81, 138	Zerbino J.O.	120