



# IX Jornadas Abiertas de Física

20 de Noviembre al 22 de Noviembre de 2018

Bahía Blanca, Buenos Aires

Argentina

## COMITÉ ORGANIZADOR

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur- IFISUR

Dr. Alfredo Juan

Dra. Gabriela F. Cabeza

Dr. Norberto J. Castellani

Dr. Marcelo Costabel

Dra. Paula Jasen

Dr. Aldo Pezzutti

## COLABORADORES

Tec. Pablo Orellana

Lic. Julián Juan

Dra. Silvia Fuente

Dra. Lorena Meier

Dra. Sol Otero

Dra. Cecilia Morgade

Dr. Pablo Bechthold

## Cronograma

Horario	Martes 20 - AM	Miércoles 21 - CHC	Jueves 22 - CHC
9:00-9:50		Dr. Alejandro Giorgetti (Univ. Verona)	Ing. Carlos Matrángolo (UNS-CCT)
9:50-10:40		Dr. Leopoldo Gómez (UNS-IFISUR)	Mg. Fernando Caba (UNS - DGT)
10:40-11:00		Café	Café
11:00-11:50		Dr. Martín Turienzo (UNS-INGEOSUR)	Dr. Mariano Febbo (UNS-IFISUR)
11:50-12:40		Dr. Daniel Gregori (UNS-INGEOSUR)	Ing. Néstor Sánchez Fornillo (UNS)
12:40-14:30		Almuerzo (libre)	Almuerzo (libre)
14:30-15:00			Ing. Andrés Romero (UNS)
15:00-15:30			Clga. Doris Rivadeneira (UNS)
15:30-16:00			Posters
16:00-16:30			Café
16:00-17:30			Posters
18:00	Dra. Teresa Dova (UNLP - CERN)		Cierre
20:30	Cóctel bienvenida (SF)		

## Títulos de charlas

Horario	Martes 20 de Noviembre – AM
18:00 – 19:00	<b>Dra. Teresa Dova.</b> En busca de la elementalidad: exploraciones y descubrimientos en física de altas energías
Horario	Miércoles 21 de Noviembre – CHC
9:00-9:50	<b>Dr. Alejandro Giorgetti.</b> Protein Bioinformatics and Multi-Scale simulations: it takes two to tango
9:50-10:40	<b>Dr. Leopoldo Gómez.</b> Geometría y topología de materiales con moléculas enredadas: Un estudio experimental utilizando tomografía de rayos X de bandas elásticas
11:00-11:50	<b>Dr. Martín Turienzo.</b> Interpretación sísmica de estructuras tectónicas en la Cuenca Neuquina y su importancia en la búsqueda de hidrocarburos
11:50-12:40	<b>Dr. Daniel Gregori.</b> Contribución de los estudios geofísicos en la resolución de la geología del norte de Patagonia
Horario	Jueves 22 de Noviembre – CHC
9:00-9:50	<b>Ing. Carlos Matrángolo.</b> Física, físicos e internet de las cosas (IoT)
9:50-10:40	<b>Mg. Fernando A. Caba.</b> Internet entre nosotros
11:00-11:50	<b>Dr. Mariano Febbo.</b> Grupo de cosecha de energías: logros y perspectivas
11:50-12:40	<b>Ing. Néstor Sánchez Fornillo</b> Tablero para proyectos y casos abiertos STEM en docencia universitaria
14:30-15:00	<b>Ing. Andrés Romero.</b> Tecnicatura y Licenciatura en Óptica: aspectos académicos, profesionales y experiencias
15:00-15:30	<b>Clga. Doris Rivadeneira.</b> Éxito en la adaptación de lentes de contacto



## **En busca de la elementalidad: exploraciones y descubrimientos en física de altas energías**

**Dra. Teresa Dova**

*Universidad Nacional de La Plata*

*email: dova@fisica.unlp.edu.ar*

**Palabras Claves:** física altas energías, bosón Higgs

María Teresa Dova estudió Física en la Universidad Nacional de La Plata, donde completó su doctorado en 1988 con una tesis en el campo de la materia condensada. Inmediatamente después, comenzó sus investigaciones en física de altas energías en el laboratorio de la Organización Europea para la Investigación Nuclear, más conocida como CERN (Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire), en Suiza y, desde entonces, estuvo involucrada en la búsqueda del bosón de Higgs, llamada en los medios masivos de comunicación “la partícula de Dios”. En 1993 inició el grupo experimental de partículas del Instituto de Física de La Plata (UNLP-CONICET). Actualmente es Profesora Titular de la UNLP e Investigadora Superior del CONICET. Su interés por la física en las condiciones más extremas la llevó a estudiar, también, la naturaleza de los rayos cósmicos en el observatorio Pierre Auger (Malargüe, Argentina). Desde hace casi una década participa con su grupo del experimento ATLAS del Gran Colisionador de Hadrones del CERN, donde contribuyeron, entre otras investigaciones, con el histórico descubrimiento del bosón de Higgs. Durante su trayectoria científica recibió importantes distinciones, tales como la Beca de la John Simon Guggenheim Foundation (2001), el Premio doctor Eduardo P. D. de Robertis, el Premio Scopus (Elsevier, Holanda) 2007 y el título de Profesora adjunta en la Northeastern University de Boston. En 2008 fue nombrada Ciudadana Ilustre de la ciudad de La Plata y en 2016 Ciudadana Ilustre de la Provincia de Buenos Aires por sus logros científicos. En el 2008 recibió el Premio Mujer Destacada del Año de la H.C. de Diputados de la Nación. Motivada por llevar la ciencia a la sociedad en el 2015 publicó el libro *Qué es el bosón de Higgs* (Paidós).

### **Resumen**

Analizando millones de millones de datos experimentales colectados con el detector ATLAS del Gran Colisionador de Hadrones (LHC), estudiamos las partículas elementales de la materia y las fuerzas fundamentales entre ellas, avanzando así en la comprensión de nuestro universo. Estos experimentos, construidos en la frontera de la tecnología, han sido diseñados para la búsqueda de nuevos fenómenos físicos en las colisiones a altísimas energías entre protones. Nos espera una década de descubrimientos y los argentinos somos partes de esta aventura en la frontera de la ciencia y la tecnología.



## **Protein Bioinformatics and Multi-Scale simulations: it takes two to Tango**

**Alejandro Giorgetti**

*Dept. Biotechnology, University of Verona Strada Le Grazie 15, I-37134 Verona, Italy and IAS-5 / INM-9 Computational Biomedicine - Institute for Advanced Simulation (IAS) / Institute of Neuroscience and Medicine (INM) Forschungszentrum Jülich D-52425 Jülich, Germany*

**Palabras Claves: Bioinformatics, Simulations, GPCRs**

### **Resumen**

Membrane proteins, in particular G-protein coupled receptors constitute major targets for pharmaceutical intervention. Related drug design efforts rely on the identification of ligand binding poses. However, the limited experimental structural information available for these receptors may make this extremely challenging, especially when only low-resolution homology models are available. In these cases, extensive bioinformatics analyses of their evolutionary history and structural predictions can be improved by a variety of molecular dynamics simulation approaches.

Here, I will present recent developments and applications of a combination of state of the art bioinformatics with multiscale simulation approaches.

I will show that both techniques are highly complementary and a combined protocol is fundamental to gather reliable structural/functional information on the receptors.



## Geometría y topología de materiales con moléculas enredadas: Un estudio experimental utilizando tomografía de rayos X de bandas elásticas

**Leopoldo R. Gómez**

*Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Avenida L. N. Alem 1253, B8000CPB-Bahía Blanca, Argentina. lgomez@uns.edu.ar*

**Polímeros anillo, empaquetamientos compactos, tomografía de rayos X**

### Resumen

Los polímeros anillo (*ring polymers*) son materiales macromoleculares formados por moléculas lineales largas que se encuentran unidas en sus extremos. En fundidos, o soluciones concentradas, estos materiales se encuentran formados por conglomerados de estos anillos, pudiendo estar altamente entrelazados entre sí. Si bien la síntesis precisa de este tipo de moléculas es relativamente reciente (2008), estos sistemas aparecen naturalmente en sistemas biológicos, siendo el empaquetamiento compacto del ADN circular en células procariontas el ejemplo más conocido.

Actualmente es muy poco lo que se sabe sobre la estructura y dinámica de estos sistemas, fundamentalmente porque el carácter cíclico de las moléculas no permite la difusión de las mismas con mecanismos similares a los de polímeros lineales (reptación).

En este trabajo se modelan las propiedades estructurales de polímeros anillo y ADN circular, utilizando tomografías de rayos X de empaquetamientos compactos de bandas elásticas de distintos tamaños. Una vez obtenida la tomografía de un ensamble de bandas, el análisis de la estructura comienza por la identificación de cada una de las bandas elásticas (ver figura). Esto no sólo permite estudiar en detalle las propiedades geométricas de las conformaciones de cada banda, sino también la forma en que las bandas elásticas se entrelazan con otras. Las tomografías muestran que cuando las bandas elásticas son muy cortas casi no hay entrelazamiento entre las mismas, y el sistema tiene un orden tipo discótico (cristal-líquido), con correlaciones orientacionales de corto alcance. A medida que la longitud de las bandas crece, el confinamiento producido por el contenedor fuerza configuraciones más plegadas, con lo que el sistema se comienza a enredar. Notablemente, para bandas elásticas largas cuyo diámetro es aproximadamente 3 veces el diámetro del contenedor, se encuentra que todas las bandas se encuentran entrelazadas entre sí. Interesantemente, este tipo de sistemas desordenados y altamente entrelazados no puede ser descrito por ninguna de las teorías actuales de dinámica de polímeros.

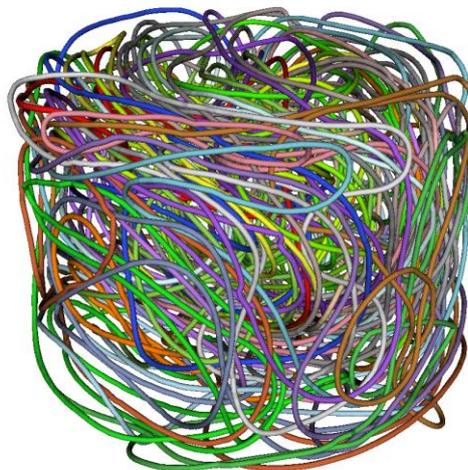


Figura: Tomografía de un ensamble de bandas elásticas, donde cada banda es identificada mediante un color diferente.



## **Interpretación sísmica de estructuras tectónicas en la Cuenca Neuquina y su importancia en la búsqueda de hidrocarburos**

**Martín Turienzo**

*Instituto Geológico del Sur (INGEOSUR, UNS-CONICET), Departamento de Geología, Universidad Nacional del Sur – Bahía Blanca – Argentina. turienzo@uns.edu.ar*

**Palabras Claves:** sísmica, estructuras, Neuquén, hidrocarburos

### **Resumen**

La caracterización geométrica en subsuelo de las estructuras formadas en respuesta a los procesos tectónicos que han deformado la corteza superior requiere fundamentalmente una sólida interacción entre estudios geofísicos y de geología estructural. La interpretación sísmica (2D y 3D) es sin duda la herramienta más importante a fin de evaluar las posibles acumulaciones de hidrocarburos en la Cuenca Neuquina pues, además de revelar estructuras que muchas veces no presentan expresión en superficie, permite analizar su configuración espacial mediante la elaboración de mapas estructurales en profundidad. El inicio de la Cuenca Neuquina ocurrió en el Triásico tardío, hace más de 200 millones de años, y hasta la actualidad ha sido afectada por distintos regímenes de deformación que le han impreso rasgos estructurales característicos. En base a esto pueden subdividirse tres grandes regiones, el engolfamiento Neuquino, la dorsal de Huincul y la faja plegada. El sector del engolfamiento es el más extenso y comprende la parte oriental de la cuenca, en la cual se concentran la mayoría de los yacimientos en explotación fundamentalmente entre las ciudades de Neuquén y Rincón de los Sauces. El estilo estructural en buena parte de estos yacimientos es relativamente sencillo y por lo tanto fácilmente reconocible en la sísmica, con fallas normales y hemigrábenes asociados de rumbo dominante NO-SE, formadas bajo un régimen tectónico distensivo en los estadios iniciales de la cuenca [1]. La dorsal de Huincul es un rasgo morfoestructural positivo con orientación E-O que se extiende aproximadamente entre las ciudades de Neuquén y Zapala y que fue afectada por esfuerzos compresivos durante gran parte del Jurásico. Este régimen tectónico superpuesto a la estructura extensional previa generó excelentes ejemplos de estructuras de inversión tectónica [2], además de estructuras transpresivas y compresivas, que han sido estudiados en detalle debido a la abundante información sísmica 3D vinculada a los numerosos yacimientos del área. La faja plegada abarca todo el sector occidental de la cuenca, en la región andina, y forma un cinturón montañoso de orientación general N-S caracterizado por un intenso plegamiento asociado a fallamiento inverso producto de sucesivas etapas de compresión tectónica ocurridas principalmente en el Cretácico tardío-Paleógeno y en el Mioceno. La compleja geometría propia de este tipo de estructuras hace muy difícil su reconocimiento sísmico. Adicionalmente el continuo avance de la deformación andina produce el levantamiento y erosión de la mayor parte de las rocas con potencial reservorio, por lo tanto los únicos yacimientos de hidrocarburos se localizan en la región frontal de la faja plegada del norte de Neuquén [3], y sur de Mendoza. La combinación de estudios geológicos de superficie con la información de subsuelo disponible demuestra ser una valiosa herramienta para caracterizar el estilo estructural en estos frentes altamente deformados [4], y de esta manera reevaluar el potencial exploratorio y orientar las futuras tareas de prospección en la faja plegada de la Cuenca Neuquina.

### **Referencias**

- [1] E. Cristallini, R. Tomezzoli, G. Pando, C. Gazzera, J. Martínez, J. Quiroga, M. Buhler, F. Bechis, S. Barredo, O. Zambrano; Revista de la Asociación Geológica Argentina 65 (2009) 248-264.
- [2] G. Grimaldi, S. Dorobeck; AAPG Bulletin 95-1 (2011) 27-60.
- [3] G. Zamora Valcarce, T. Zapata, A. Ansa, G. Selva; AAPG Bulletin 90-3 (2006) 307-319.
- [4] M. Turienzo, N. Sánchez, F. Lebinson, L. Dimieri en The evolution of the Chilean-Argentinean Andes, A. Folguera et al. (Eds). Springer Earth System Sciences, Suiza (2018): 411-441.



## **Contribución de los estudios geofísicos en la resolución de la geología del norte de Patagonia**

**Daniel A. Gregori**

*Cátedra de Geología Argentina, Departamento de Geología, Universidad Nacional del Sur e INGEOSUR, Av. Alem 1253, cuerpo B. 2º Piso, 8000, Bahía Blanca, Argentina, usgregor@gmail.com*

**Palabras Claves:** Configuración geológica, geofísica, Patagonia, Argentina

### **Resumen**

Una de las mayores controversias geológicas de Argentina ha sido la configuración de las unidades Paleozoicas ubicadas entre el Río Negro y la parte sur de las provincias de La Pampa y Buenos Aires. Ello se debe a la notable cobertura sedimentaria actual que impide establecer la continuidad de dichas unidades entre la parte central de Argentina y la patagónica. Varias hipótesis trataron de explicar la supuesta diferencia entre estas regiones, incluyendo aquella que dice que Patagonia es un continente alóctono, extraño a Sudamérica. El límite norte del mismo se encontraría entre los ríos Colorado y Negro. La falta de estudios detallados en el norte de Patagonia hizo que esta hipótesis perdurara hasta hace poco.

Con el propósito de establecer el diseño geológico de la región arriba citada, desde el año 2004 hasta el año 2008 se realizaron innumerables campañas geofísicas y geológicas, con la participación de docente e investigadores de las Cátedras de Geofísica y Geología Argentina, del Departamento de Geología de la UNS (Kostadinoff, Gregori, Álvarez, Strazzere, Barros, Martínez, Raniolo). El área estudiada sobrepasa los 175.000 km<sup>2</sup>, y en ella se realizaron mediciones del campo gravitatorio y magnético, determinación de densidad de rocas, mediciones de susceptibilidad magnética y análisis de sísmica de refracción.

Los resultados mostraron que, en subsuelo, el norte de Patagonia muestra un diseño tipo “rompecabezas” formado por sectores con anomalías positivas y negativas residuales de Bouguer. Estos sectores o “bloques” están separados entre sí por fajas curvilineares, donde la gravedad tiene gradientes anómalos.

Varios sectores con anomalías positivas residuales de Bouguer localizados en la provincia de La Pampa y al sur del río Negro coinciden con afloramientos de rocas metamórficas del ciclo Pampeano (600-510 Ma) del centro de Argentina. La modelización de las anomalías positivas ubicadas entre los ríos Colorado, Negro y zonas adyacentes permitieron establecer que las rocas de dicho ciclo forman un cinturón NNO-SSE que cruza el aparente límite entre el centro de Argentina y el supuesto continente alóctono de Patagonia.

Anomalías negativas residuales de Bouguer ubicadas al norte y sur de dicho límite se relacionan con afloramientos de rocas pertenecientes al ciclo Famatiniano (510-360 Ma). Ellas formaron cuencas marinas (Sierra de la Ventana, Bs. As. y Sierra Grande, Río Negro). Entre las mismas se ubica una zona de alto gradiente gravimétrico que se correlaciona con la Falla de Huincul (Neuquén). La misma habría desplazado dextralmente las cuencas arriba citadas por más de 300 km. Estos resultados implican que Patagonia no es un continente alóctono o extraño, sino una parte de Sudamérica que se ha desplazado en dirección oeste a lo largo de 170 Ma.

En lo que hace al ciclo Gondwánico (360-200 Ma) su diseño geológico revela la presencia de rocas graníticas intruidas en rocas de los ciclos Pampeano y Famatiniano.

El ciclo Patagónico (200-100 Ma), está representado por cuencas sedimentarias y volcánicas que cubren los ciclos arriba citados. La Falla de Huincul y otras equivalentes generaron espacios para la formación de depocentros y deformaron dichos depósitos, otorgándole al norte de Patagonia su actual diseño.



## Física, Físicos e Internet de las Cosas (IoT)

**Carlos Matrángolo**

*DIEC y DCIC, Universidad Nacional del Sur, Complejo Palihue, San Andrés 800, (8000) Bahía Blanca  
Argentina  
email: symatran@criba.edu.ar*

**Palabras claves: Internet de las Cosas, IoT**

### Resumen

De la conjunción de la identificación por radiofrecuencia, los sensores y sistemas embebidos, las redes de sensores e INTERNET surge una tecnología fuertemente centralizada en la comunicación inalámbrica y el bajo consumo de energía, que en el año 1999 Kevin Ashton, cofundador y director ejecutivo del Auto-ID del MIT, bautizó como "INTERNET de las Cosas" (o IoT por sus siglas en inglés, Internet of Things). Se produjo el gran cambio, las computadoras pasaron a tener conocimiento del mundo físico que las rodea. En 2017, Heike Riel, director del área de investigaciones en ciencias físicas de IBM en Zurich, lo marcó al decir "el mundo físico está siendo digitalizado".

La arquitectura de IoT comprende básicamente sensores inteligentes ("motes"), comunicaciones inalámbricas (Zigbee, Lora Sigfox, celular, etc.), Internet (IPv6), almacenamiento, análisis y visualización de datos. En 2011, la empresa CISCO presagió que para el 2020 se habrían desplegado en el mundo más de 20.000 millones de sensores y multimillonarias ganancias para la industria, lo cual atrajo la atención de más actores, enfocados en distintos dominios de aplicación, como la salud, la energía, las ciudades, entre otros. En este camino de desarrollo, en base a la potencialidad de la infraestructura IoT y a la necesidad de efectivizar conceptos como el de gobernanza y de sustentabilidad, se introdujo el término "smart", que traducimos al castellano como "Inteligente", y entonces hablamos de "ciudades inteligentes", "sistemas de energía inteligentes", "sistemas de salud inteligentes", por citar los más relevantes.

Esta creciente complejidad ha generado la incorporación a la arquitectura de IoT de Big Data, computación en la nube (Cloud Computing), analítica (Analytics), and visualización (Visualization), y recientemente la introducción de Inteligencia Artificial (Deep Learning y Redes Neuronales).

En el mercado ya existen y se promocionan algunas soluciones, pero para hacer realidad el gran potencial de IoT se necesita de avances científicos en todos los niveles. La física como disciplina tradicionalmente ha sido un fuerte actor en las tecnologías de la información y las comunicaciones, en particular en la computación de alto desempeño (HPC) y en el despliegue de INTERNET. IoT ofrece a los físicos un nuevo espacio de investigación, desarrollo e innovación. Esto se puso de relieve en la Conferencia de Física Industrial de Actualización de Internet de las Cosas, de la Sociedad de Física Americana, realizada en la ciudad de Monterrey en el año 2017 [1].

Hoy Internet de las Cosas es un nuevo desafío para los físicos y seguramente los físicos también le van a plantear nuevos desafíos a IoT.

### Referencias

[1] Actualization of the Internet of Things. A FIAP Industrial Physics Conference, American Physical Society. Monterey, CA, April 17-19, 2017. <https://www.aps.org/units/fiap/meetings/conference/index.cfm>



## Internet entre nosotros

**Mg. Fernando Caba**

*Dirección General de Telecomunicaciones, Universidad Nacional del Sur, Avenida Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina. [fcaba@uns.edu.ar](mailto:fcaba@uns.edu.ar)*

**Palabras Claves: Internet, conectividad, ruteo, protocolo**

### Resumen

La red mundial se ha propagado entre nosotros a pasos agigantados. Este proceso tecnológico para la gran mayoría de sus usuarios ha pasado desapercibido en cuanto al gran despliegue de la conectividad. La tecnología ha permitido aumentar notablemente las velocidades de transmisión, provocando que altísimos volúmenes de información viajen de un extremo al otro del planeta en fracciones de segundo. Caminando por las calles de una ciudad, concurriendo a un paseo público o transitando una carretera, no advertimos la gran cantidad de información que viaja bajo (o junto a) nosotros por fibras ópticas transportando datos mediante pulsos lumínicos o bien somos atravesados por radiaciones electromagnéticas transportando datos mediante complejos esquemas de modulación de estas señales.

Los primeros pasos de las redes de datos sin dudas fueron complejos, no solo desarrollando equipamiento tecnológico muy costoso, sino también desarrollando complejos protocolos para la interconexión de puntos distantes.

El advenimiento de las redes de conmutación de paquetes, revolucionó las telecomunicaciones. La cantidad de usuarios y los volúmenes de tráfico rápidamente se incrementaron exponencialmente, tendencia que en la actualidad también se manifiesta y se predicen a futuro.

El desarrollo de protocolos adecuados para poder dirigir el tráfico a donde corresponde fue otro importante hito para el crecimiento de Internet. Sin ellos, Internet no podría tener el dinamismo necesario para darle robustez a una comunicación entre diferentes puntos, facilitando la transmisión de datos por caminos alternativos en caso de fallas o congestión de la red.

La Universidad ha invertido durante estos últimos años en tecnología de vanguardia, para brindar a toda la comunidad Universitaria la mejor calidad en telecomunicaciones a la altura de las mejores instituciones de otras latitudes. En esta charla se brindarán detalles sobre la evolución de su amplia red de datos, desde los comienzos hasta la actualidad.



## **Grupo de Cosecha de Energía IFISUR-UNS-CONICET: logros y perspectivas**

**Dr. Mariano Febbo**

*Instituto de Física del Sur (IFISUR) y Departamento de Física, Universidad Nacional de Sur (UNS), CONICET  
Avda Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*

**Palabras Claves: Cosecha de energía. Logros. Perspectivas.**

### **Resumen**

En esta charla presentaremos el grupo de Cosecha de Energía del departamento de Física de la UNS que viene trabajando en forma teórico-experimental desde hace varios años. Aprovechando la oportunidad, también se presentará el laboratorio de Cosecha de Energía, de reciente formación, que desde hace unos meses forma parte de uno de los 4 laboratorios de investigación y desarrollo que existen actualmente en el Instituto de Física del Sur (IFISUR) de doble dependencia UNS-CONICET. La cosecha de energía es el aprovechamiento de la energía del ambiente [1] para convertirla en energía eléctrica, de forma de aprovechar la energía que de otro modo se disiparía sin ningún uso. En este sentido, en una época en donde el interés por las energía limpias y renovables es cada vez mayor, la cosecha de energía se presenta como una alternativa más que interesante, tanto en posibilidades de desarrollo como de generación de valor agregado a productos de interés tecnológico. Reportes de la literatura aseguran que el mercado de cosecha de energía piezoeléctrica crecerá hasta ser de 660 millones de dólares en 2022 [2]. En este charla se presentarán, además de los aspectos ya mencionados, las facilidades con que cuenta el laboratorio, los desarrollados generados hasta el momento [3,4,5], los laboratorios asociados tanto del país como del extranjero, los proyectos que se encuentran en vigencia y las posibilidades de realizar dentro del grupo tanto estudios de grado como de posgrado.

### **Referencias**

- [1] S Priya. D. Inman; Energy Harvesting Technologies, Ed. Springer N.Y. USA (2009).
- [2] R. Das, Piezoelectric Energy Harvesting 2013-2023: Forecasts, Technologies, Players, (2018) [www.IDTechEx.com/piezo](http://www.IDTechEx.com/piezo).
- [3] S. P. Machado, M. Febbo, F. Rubio-Marcos, L. A. Ramajo, M. S. Castro, Smart Materials and Structures 24 (2015), 115011 (8pp)
- [4] M Febbo S. P. Machado, C D. Gatti y J. M Ramirez, Energy Conversion and Management, 152 (2017) 166-175.
- [5] J. M. Ramirez, C.D. Gatti, S.P. Machado, M. Febbo Extreme Mechanics Letters, 22 (2018) 1-7



## **Tablero para proyectos y casos abiertos STEM en docencia universitaria.**

**Néstor Edgardo Sanchez Fornillo**

*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Avenida Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*

[nesanfor@uns.edu.ar](mailto:nesanfor@uns.edu.ar)

**Palabras claves:** docencia universitaria, canvas, STEM

### **Resumen**

Las actividades basadas en proyectos y casos abiertos - en particular aquellos de índole experimental - se han planteado en la literatura como una técnica docente relevante para propiciar el aprendizaje en el aula universitaria. No obstante, la aplicación responsable de esta técnica confronta a docentes y alumnos con compromisos de planificación para unos y dificultades de implementación para los otros. Ciertamente estas actividades en que "todo puede complicarse" (pero no debería) requiere - simultáneamente - de atención al detalle y percepción global. Es así que se propone una metodología basada en tableros (*canvas*). Por un lado, para que el docente diseñe y articule la actividad; y por otro, para que los equipos de alumnos lleven un auto-control de la implementación de la misma. La modalidad iterativa para completar los contenidos del tablero permite contrastar en tiempo real el desarrollo de ambas actividades con los resultados de aprendizaje (*learning outcome*) esperados, lo que implica que también pauta el proceso de evaluación. El ajuste para actividades articuladas STEM es inherente a la propia estructura metodológica propuesta. Se presenta un caso como ejemplo de aplicación en el aula de esta técnica.



## **Tecnicatura y Licenciatura en Óptica: aspectos académicos, profesionales y experiencias.**

**Andrés Esteban Romero\* y Epullan Estefania.**

*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, CP 8000, Bahía Blanca, Argentina*

*\*[andresrom147@hotmail.com](mailto:andresrom147@hotmail.com)*

**Palabras Claves:** Elección, Vocación, Habilidad, Proyección.

### **Resumen**

Durante el desarrollo de la conferencia se expondrá la estructura de ambas carreras, sus alcances y objetivos, se presentará al público las distintas ramas en que se basa la formación así como también los métodos y experiencias implementadas, intentando de este modo mostrar a futuros alumnos e interesados las distintas incumbencias del futuro profesional, como así mismo las responsabilidades a que se encuentra sujeto.

### **Referencias**

- Manual del óptico Dr. Alejandro Gleichen y Erick Klein editorial Gustavo Gili 1926
- Elementos de óptica oftálmica Dr Bernardo Schcolnicov editorial Novalent 1979
- Fundamental of optics - Francis A. Jenkins & Harvey E. White McGraw-Hill 1957
- The theory of Microscope - James R Benford, Bausch & Lomb Optical Co 1959
- Elementos de óptica Instrumental - Silverio Troncoso- editorial librería Mitre 1977
- Compendio General de topografía Teórico Práctica (óptica) Tomo II Volumen 1 Editorial Roberto Muller 1952
- Fundamentos de Física III Optica - Sears - Editorial Aguilar



## Éxito en la adaptación de lentes de contacto

**Doris Rivadeneira Bueno**

*Universidad Nacional Del Sur, Departamento de Física*

*Doris.rivadeneira @uns.edu.*

**Palabras Claves: comodidad, visión, necesidades, control.**

### **Resumen**

Los lentes de contacto como alternativa de corrección visual son hoy en día una de las formas más confiables para el manejo de los problemas visuales, gracias a los avances tecnológicos en los diseños y estructuras de las lentes de contacto permiten ofrecer soluciones a prácticamente todos los pacientes con ametropías.

Cuando un contactólogo adapta lentes de contacto debe de tener en cuenta varios factores que le van a permitir el éxito en la adaptación: anamnesis, pruebas preliminares, adaptación de las lentes de prueba, entrega y controles.

Es importante tener en cuenta las necesidades de cada paciente y su condición de salud visual, para de esta manera brindarle la mejor solución a sus necesidades. El profesional debe asegurarse que el paciente se sienta cómodo con sus lentes en cuanto al confort y visión. Y esto sólo se logra realizando una completa evaluación preliminar, escogiendo el lente ideal, explicándole al paciente todos los cuidados que debe tener con sus lentes y realizando los controles pertinentes.

En esta charla se brindarán aspectos importantes para garantizar una correcta adaptación de las lentes de contacto.



## Estudio a nivel plenamente diferencial de la ionización de $H_2O$ por impacto de electrones y positrones en el marco del modelo CDW-EIS

Emiliano Acebal\* y Sebastián Otranto

Departamento de Física, Instituto de Física del Sur (IFISUR), Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB-Bahía Blanca, Argentina. \*emiliano.acebal@uns.edu.ar

**Palabras Claves:** ionización de  $H_2O$ ; CDW-EIS; sección eficaz plenamente diferencial; partículas livianas

### Resumen

En este trabajo se presentan secciones eficaces plenamente diferenciales para la ionización de  $H_2O$  en fase gaseosa por impacto de electrones y positrones. La energía de impacto considerada es de 81 eV y el modelo teórico utilizado es el de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS).

La comprensión de la dinámica de procesos de colisión sobre moléculas de  $H_2O$  es de singular importancia, ya que este blanco puede ser utilizado como prototipo de medio biológico y es también un componente de importancia en contextos astrofísicos.

En este sentido, en el presente estudio se analizan los datos experimentales recientemente obtenidos por Ren *et. al.* [1] por medio de un microscopio de reacción, y que corresponden a la detección de electrones emitidos de los orbitales de valencia  $1b_1$  y  $3a_1$  de la molécula de  $H_2O$ . Las secciones eficaces plenamente diferenciales obtenidas experimentalmente representan de este modo la suma de las contribuciones provenientes de ambos orbitales. En el trabajo original, los autores contrastaron sus mediciones con las predicciones de la Aproximación de Born de onda distorsionada (DWBA) logrando un acuerdo de tipo cualitativo en el mejor de los casos.

En contraste con la DWBA, que es considerada una teoría de primer orden, el modelo CDW-EIS considera de forma explícita órdenes superiores en la correlación de estado inicial.

En nuestros cálculos, la amplitud de transición para orientaciones fijas de la molécula ha sido obtenida por una integración numérica 6-dimensional utilizando un esquema de Monte Carlo adaptivo. Las secciones eficaces obtenidas fueron posteriormente promediadas para imitar las condiciones experimentales. La incerteza numérica se estima en un 5%.

Del análisis de los resultados obtenidos, y tras explorar diversas geometrías de colisión, podemos concluir que el modelo CDW-EIS tiene mucho mejor acuerdo con los datos experimentales reportados que el modelo DWBA [2].

Por último, se discutirá la influencia del signo de carga del proyectil al analizar las estructuras que conforman las secciones eficaces plenamente diferenciales obtenidas mediante positrones [3]. Si bien no existen a la fecha datos experimentales para el sistema positrón- $H_2O$ , la reciente medición de secciones eficaces plenamente diferenciales de Ar por impacto de positrones tornan ésta una posibilidad no muy lejana.

### Referencias

- [1] X. Ren, S. Amami, K. Hossen, E. Ali, C. G. Ning, J. Colgan, D. Madison, A. Dorn; Phys. Rev. A 95 (2017) 022701 (1-6).
- [2] E. Acebal, S. Otranto; Phys. Rev. A 98 (2018), 012703 (1-5).
- [3] E. Acebal, S. Otranto. Enviado al Eur. Phys. J. D (2018).



## Estudio Computacional de los Modos de Unión de Ligandos del Sitio de Unión de las Benzodiazepinas en los Receptores GABA<sub>A</sub>.

María Julia Amundarain<sup>1</sup>, Viso Juan Francisco<sup>1</sup>, Fernando Zamarreño<sup>1</sup>, Alejandro Giorgetti<sup>2</sup>, Marcelo Costabel<sup>1</sup>

1. Grupo de Biofísica, Instituto de Física del Sur (IFISUR) – Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina.

2. Lab. di Bioinformatica applicata, Dip. Biotecnologie, Università degli Studi di Verona, Verona, Italia.

**Palabras Claves:** GABA<sub>A</sub>Rs, Docking Molecular, Benzodiazepinas, Dinámica Molecular

### Resumen

Los receptores del ácido  $\gamma$ -aminobutírico del tipo A, GABA<sub>A</sub>Rs, pertenecen a la familia de canales iónicos activados por ligando y son los principales mediadores de la transmisión inhibitoria rápida en el Sistema Nervioso Central (SNC) de mamíferos. Son el blanco de una amplia variedad de compuestos tales como GABA, benzodiazepinas (diazepam, clonazepam), anestésicos,  $\beta$ -carbolinas y neuroesteroides, y juegan un papel fundamental en la salud neurológica.

El objetivo de este trabajo es intentar elucidar los modos de unión de ligandos farmacológicamente relevantes del sitio de unión de las BZDs, que incluyen BZDs clásicas, imidazo-BZDs, zolpidem y eszopiclona. Aplicamos métodos de la biofísica computacional: docking y dinámica molecular para llevar a cabo este estudio. Además utilizamos un modelo del receptor  $\alpha_1\beta_2\gamma_2$  obtenido mediante modelado por homología, basado en la estructura del homopentámero de subunidades  $\beta_3$  (PDBID: 4COF).

El docking molecular fue realizado mediante dos métodos distintos: por un lado se empleó HADDOCK en el cual se introduce la información experimental disponible como restricciones ambiguas a las interacciones, y AutodockVina que realiza una optimización local a partir de configuraciones iniciales aleatorias. Si bien los modos de unión más favorable de acuerdo a estos programas no fueron estrictamente los mejores resultados (por contrastación con datos experimentales), en todos los casos se obtuvieron modos que se ajustaban a dicha información.

Con el fin de evaluar la estabilidad de los complejos realizamos simulaciones de dinámica molecular de 100ns de los sistemas empleando el programa GROMACS. Las simulaciones fueron realizadas en un entorno acuoso, con iones en una concentración fisiológica y el receptor embebido en una membrana de POPC. Para describir la proteína se empleó el campo de fuerza gromos53a6, el modelo de aguas SPC y los parámetros de Berger para los fosfolípidos. El cálculo de la Desviación Cuadrática Media para los átomos del esqueleto de la proteína muestra que en todos los casos el receptor no atraviesa grandes cambios conformacionales globales, sino que la presencia de los ligandos y la relajación de las cadenas laterales generan modificaciones locales.

Mediante el empleo de información experimental se pudo hipotetizar modos de unión para ligandos del sitio de unión de gran afinidad de las BZDs en los receptores GABA<sub>A</sub>. Estos compuestos permanecieron unidos en su sitio durante todas las simulaciones de dinámica molecular y mejoraron sus contactos con el receptor. Teniendo en cuenta estos resultados, podemos afirmar que el modelo realizado puede ser empleado para investigaciones futuras de unión de ligandos en este sitio.



## Colisiones de iones múltiplemente cargados con He: evaluación de modelos clásicos con dos electrones activos

Nicolás Bachi\* y Sebastián Otranto

Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB-Bahía Blanca, Argentina. \*nicolas.bachi@uns.edu.ar

**Palabras Claves:** Modelos clásicos para He, CTMC, ionización, captura electrónica

### Resumen

En este trabajo se presenta una evaluación detallada de las propiedades físicas de dos modelos clásicos para el átomo de He propuestos en la literatura. Las secciones eficaces totales resultantes de procesos de colisión de protones y proyectiles de mayor carga con He son evaluadas mediante el método de trayectorias clásicas Monte Carlo (CTMC). Estos modelos incorporan en el Hamiltoniano del blanco potenciales dependientes de los momentos a fin de evitar la inestabilidad propia de los tratamientos clásicos de blancos multieletrónicos.

El primer modelo evaluado, presentado por Kirschbaum y Wilets [1], se denomina potencial de núcleo de Heisenberg (Heisenberg Core) y el segundo, propuesto por Cohen [2], se denomina modelo de energía restringida (Energy Bounded). En ambos casos, diferentes autores han utilizado diversos conjuntos de parametrizaciones para caracterizar estos potenciales basándose en criterios físicos particulares [1-4].

En el presente estudio se utiliza el criterio introducido por Zhou *et al* [4] y se propone un nuevo conjunto de parámetros para los potenciales en cuestión. En primer lugar se analizan las implicaciones físicas en lo que respecta a las propiedades del blanco de He (distribución espacial y energética de los electrones) en ausencia de proyectil. A continuación se muestran y discuten las secciones eficaces totales referidas a procesos de colisiones por protones,  $C^{6+}$  y  $O^{8+}$ . El rango de energía de impacto considerado es 10 keV/amu-2 MeV/amu. Los resultados teóricos obtenidos mediante los modelos HC y EB son comparados con los datos experimentales de Shah y Gilbody [5,6].

### Referencias

- [1] C. L. Kirschbaum y L. Wilets, Phys. Rev. A 21 (1980) 834 – 841.
- [2] J. S. Cohen, Phys. Rev. A 54 (1996) 573 – 586.
- [3] S. Morita, N. Matsuda, N. Toshima y K. Hino, Phys. Rev. A 66 (2002) 042719 (1 a 4).
- [4] Y. Zhou, C. Huang, Q. Liao, y P. Lu, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 053004 (1 a 5).
- [5] M. B. Shah y H. B. Gilbody, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 18 (1985) 899 – 913.
- [6] N. Bachi y S. Otranto, Eur. Phys. J. D 72 (2018) 127 (1 a 8).



## Simulación de la respuesta dosimétrica espectral de $\text{YVO}_4:\text{Eu}_3$ , por método Monte Carlo

**Claudia E. Carletti\***, Alexis Rucci y Walter R. Cravero

*Grupo de Física de Radiaciones, Instituto de Física del Sur, IFISUR y*

*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur,*

*12 de octubre 1865, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina*

*\*Carletice@gmail.com*

**Palabras Claves:** DOSIMETRIA, MONTE CARLO, RADIOLUMINISCENCIA.

### Resumen

La dosimetría por fibra óptica (FOD), se basa en el empleo de un material centellador acoplado al extremo de una fibra óptica[1-4]. Esta última colecta la luz emitida por el centellador durante la irradiación. En este trabajo se presentan resultados de simulaciones monte carlo (MC) para caracterizar la respuesta dosimétrica espectral de un detector de ( $\text{YVO}_4:\text{Eu}_{3+}$ ) para uso en dosimetría por fibra óptica. Las simulaciones fueron realizadas utilizando el código MC PENELOPE y construyendo un acelerador virtual Varian Clinac iX a partir de la base de espacios de fase de IAEA [5,7]. Se simuló los rendimientos en profundidad, y la fluencia espectral para diferentes tamaños de campo a fin de estudiar la respuesta del detector [7]. Se observó que los rendimientos en profundidad se encuentran en buen acuerdo con los obtenidos en mediciones experimentales, mostrando en ambos casos la misma dependencia con el tamaño de campo. Los resultados obtenidos fueron comparados con mediciones realizadas con cámara de ionización y simulación MC de referencia en agua [8].

### Referencias

1. Curran S, Baker W. "A Photoelectric alpha-particle detector" *Rev. Sci. Instruments* **19**, pp.116 (1944).
2. Beddar AS, Mackie TR, Attix FH. "Water-equivalent plastic scintillation detectors for high energy beam dosimetry: I. Physical characteristics and theoretical considerations". *Phys Med Biol* **37**, pp.1883–900 (1992).
3. Beddar AS, Mackie TR, Attix FH. "Water-equivalent plastic scintillation detectors for high energy beam dosimetry: I. Properties and measurements". *Phys Med Biol* **37**, pp. 1901–13 (1992).
4. Flühs D, Heintz M, Indenkampen F, Wieczorek C. "Direct reading measurement of absorbed dose with plastic scintillators-The general concept and applications to ophthalmic plaque dosimetry. *Med Phys* **23**, pp. 427–34 (1996)".
5. N. Martinez et al. "Scintillation properties of the  $\text{YVO}_4:\text{Eu}_{3+}$  compound in powder form: its application to dosimetry in radiation fields produced by pulsed mega-voltage photon beams", *Z. Med. Phys.* **25**, pp. 368-374 (2015).
6. Rucci A, Carletti C, Cravero W, Strbac B. "Use of IAEA's phase-space files for the implementation of a clinical accelerator virtual source model" *Phys. Med.* **30**, pp.242–8 (2014).
7. Capote R, Jeraj R, Ma CM, Rogers DWO, Sánchez-Doblado F, Sempau J, Seuntjens J, Siebers JV. "Phase-space database for external beam radiotherapy". In: *Summary report of a consultants' meeting*. Vienna: International Atomic Energy Agency (2006).
8. A. Rucci et al. "Use of IAEA's phase-space files for virtual source model implementation: Extension to large fields", *Physica Medica* **32**, pp. 1030-3 (2016).



## Estudio computacional del efecto de la modificación superficial de la sílica en la adsorción de la droga nedaplatino

A. Díaz Compañy<sup>1,2</sup>, E. Noseda Grau<sup>1,2</sup>, G. Román<sup>1</sup>, G. Brizuela<sup>1</sup>, A. Juan<sup>1</sup>, S. Simonetti<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup>Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), Calle 526 e/10 y 11, 1900 - La Plata, Argentina.

<sup>3</sup>Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 461, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.

E-mail: [ssimonet@uns.edu.ar](mailto:ssimonet@uns.edu.ar)

**Palabras Claves:** fármaco, liberación controlada, sílica, DFT

### Resumen

Una de las aplicaciones más importantes de la nanotecnología es la entrega dirigida de medicamentos. La comprensión del comportamiento de adsorción de la droga en su transportador es de vital importancia para comenzar a diseñar vehículos de entrega de fármacos. En este trabajo, se investiga la interacción de la droga nedaplatino con la superficie de la sílica SiO<sub>2</sub> (001): hidratada, deshidratada y funcionalizada con trimetilsilano (C<sub>3</sub>H<sub>10</sub>Si).

Analizando los resultados de los cálculos DFT realizados con el programa Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP), se observa que la superficie de la sílica no produce la degradación del fármaco, lo que permite la interacción de la droga con la superficie sin ningún impacto en su estructura química. Con la superficie de la sílica deshidratada el fármaco nedaplatino interacciona fuerte, corroborado por una energía favorable de adsorción ( $\Delta E = -9.07$  eV), mientras que esta droga interactúa débilmente con la superficie de la sílica funcionalizada ( $\Delta E = -0.62$  eV) y se adsorbe moderadamente sobre la superficie de la sílica hidratada ( $\Delta E = -2.62$  eV). La estabilidad del nedaplatino se produce principalmente por interacciones de puente hidrógeno en la superficie funcionalizada, por enlaces puente hidrógeno y una interacción adicional N-O en la superficie de la sílica hidratada, mientras que el fármaco se estabiliza principalmente a través de la formación de las interacciones N-O, O-O y la disociación parcial de H en la superficie de la sílica deshidratada.

Las diferencias en la fuerza de adsorción podrían utilizarse en futuros estudios para controlar la liberación del fármaco, de acuerdo con la dosificación, desarrollando sistemas de liberación basados en materiales de sílica para una potencial administración farmacológica controlada de la droga nedaplatino.



## Efecto de vacancias cargadas en $\text{MgH}_2$ dopado con Nb, a través de cálculos de DFT.

**Francisco Gaztañaga, Julián Juan, C. Romina Luna\*, Estela Gonzalez, Paula V. Jasen.**

*Instituto de Física del Sur - IFISUR, UNS-CONICET y Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina. \*cluna@uns.edu.ar*

**Palabras Claves:** semiconductor, spintrónica, simulación, defectos.

### Resumen

Cuando se piensa en energías alternativas, la utilización del Hidrógeno gana terreno. Lamentablemente, existen algunos inconvenientes a superar para alcanzar un completo desarrollo de esta tecnología, entre los que se encuentra el almacenamiento de Hidrógeno [1-2]. El  $\text{MgH}_2$  ha mostrado grandes virtudes en este aspecto y su estudio es de gran relevancia en la actualidad [3].

Este trabajo es una continuación del análisis del  $\text{MgH}_2$  sin impurezas [4], se estudió el efecto del Nb y vacancias cargadas, en las propiedades del  $\text{MgH}_2$ . Se realizaron cálculos de DFT con espín polarizado, sustituyendo un átomo de Mg por un átomo de Nb. Los cálculos se realizaron utilizando la teoría DFT implementada por el paquete VASP [5]. Luego se incluyeron vacancias al sistema  $\text{MgH}_2+\text{Nb}$  ( $V_{\text{H}}$ ,  $V_{\text{Mg}}$  o  $V_{\text{Mg-H}}$ ) en cada uno de los estados de carga posibles (+1, 0 o -1). Se analizó la energía de cohesión del Nb, la energía de formación de las vacancias, el *ancho de banda prohibida* y el momento magnético. También se calculó la energía de nivel de transición y la densidad de estados.

El dopado con Nb introdujo nuevos estados localizados principalmente en la región de banda prohibida; al mismo tiempo que produjo un momento magnético en el material, fuertemente localizado en el sitio donde se localiza el dopante. También se observó un corrimiento en la curva de densidad electrónica hacia valores más bajos. Cuando se analizaron los distintos tipos de vacancias cargadas, se encontró que las vacancias más probables a formarse son de Hidrógeno, tanto neutras como positivas ( $V_{\text{H}}^0$  y  $V_{\text{H}}^+$ , respectivamente). Estas vacancias generaron una distorsión asimétrica principalmente en los átomos vecinos al Nb. Además, en ambos casos se observó una fuerte disminución en el ancho de la banda prohibida y una leve reducción del momento magnético, en comparación con el sistema  $\text{MgH}_2+\text{Nb}$ .

Finalmente, podemos resumir que se obtuvo un amplio panorama de los efectos de la introducción del Nb para el sistema con y sin vacancias cargadas, donde se destaca un fuerte momento magnético localizado, dándole un uso hipotético en el área de la espintrónica. Desde el punto de vista del almacenamiento de Hidrógeno, el Nb y las vacancias debilitan los enlaces H-Mg, facilitando así la desorción del Hidrógeno.

### Referencias

- [1] Louis Schlapbach and Andreas Züttel NATURE 414 (2001) 265-270.
- [2] K. Edalati, RUehiro, Y. Ikeda et al.; Acta Materialia 149 (2018) 88-96.
- [3] M.El Khatabi, S.Naji, M.Bhihi, Journal of Alloys and Compounds 743 (2018) 666-671.
- [4] F. Gaztañaga, C. R. Luna, M. Sandoval, C. Macchi, P. Jasen; J. Phys. Chem. C 120 (2016) 22844-22851.
- [5] <https://www.vasp.at/>



## Ordenamiento catiónico en fases de Ruddlesden-Popper de orden 3 estudiado por Difracción de Neutrones y Espectroscopía de Absorción de Rayos X

Jesús Vega Castillo<sup>1\*</sup>; Gabriel Cuello<sup>2</sup>; Fernando Prado<sup>1</sup>

<sup>1</sup> División de Cerámicos Avanzados, Instituto de Física del Sur. Avda Alem 1253 Bahía Blanca (8000) Argentina.

<sup>2</sup> Institut Laue-Langevin, BP 156, F-38042 Grenoble Cedex 9, France

[\\*jvegacastillo@ifisur-conicet.gob.ar](mailto:jvegacastillo@ifisur-conicet.gob.ar)

**Palabras Claves:** Ruddlesden-Popper, NPD, XANES, EXAFS.

### Resumen

Las fases de R-P  $A_{n+1}B_nO_{3n+1}$  con  $n = 1, 2$  y  $3$  han sido estudiadas en los últimos años para ser utilizados como cátodo en las celdas IT-SOFC. Entre estos materiales podemos mencionar la cobaltita  $LaSr_3Fe_{1.5}Co_{1.5}O_{10-\square}$  ( $n = 3$ ) [1]. En este caso la presencia de metales de valencia mixta induce una elevada concentración de vacancias de oxígeno lo cual facilita la conductividad iónica en estos compuestos. Con el objetivo de incrementar la conductividad iónica se exploró la incorporación de  $Ga^{3+}$  en el sitio B formando la solución sólida  $LaSr_3(Ga_xFe_yCo_{1-x-y})_3O_{10-\square}$  [2].

En este trabajo, se ha estudiado la estructura de compuestos  $LaSr_3(Ga_xFe_yCo_{1-x-y})_3O_{10-\square}$

Para distintos valores de  $x$  e  $y$ , usando las técnicas de Difracción de Neutrones (NPD) y Absorción de Rayos X (XAS) en los bordes K del Fe y Co, barriendo las zonas cercana al borde (XANES) y extendida (EXAFS).

Los refinamientos por el método de Rietveld de los patrones NPD sugieren que los cationes de Fe y Co no están distribuidos con igual probabilidad en las tres capas de perovskita de la estructura, sino que el Co ocupa preferencialmente la perovskita central donde hay una mayor concentración de vacancias de O.

El análisis del borde XANES permitió corroborar que los cationes de Fe tienen una valencia promedio mayor que la del Co. Finalmente el análisis de la primera esfera de coordinación mediante el ajuste de los espectros EXAFS, evidencian que para todas las composiciones estudiadas, el número de coordinación promedio de O es más alto en el Fe que en el Co.

La combinación de los análisis NPD, XANES y EXAFS, arrojan como resultado la confirmación del ordenamiento de los cationes de Fe y Co en estos compuestos conductores mixtos.

### Referencias

[1] K. T. Lee, A. Manthiram, Chem. Mater. 18 (2006) 1621-1626.

[2] F. Prado, et al., J Mater. Chem. 12 (2002) 1-7.



## Efecto del soporte en las propiedades estructurales y magnéticas de filmes delgados de FeRh/MgO

M. J. Jiménez<sup>1\*</sup>, y G. F. Cabeza<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física –UNS. Av. Alem 1253. CP 8000. Bahía Blanca. Buenos Aires. Argentina

\*julia.jimenez@uns.edu.ar

**Palabras Claves:** FeRh – memorias magnéticas – DFT - magnetismo

### Resumen

La aleación FeRh es conocida por tener una transición de primer orden del estado antiferromagnético (AFM) al estado ferromagnético (FM) a medida que la temperatura crece alrededor de 50-60 K por encima de la temperatura ambiente<sup>1</sup>. Esta aleación es de interés tecnológico en la manufactura de nuevos dispositivos de almacenamiento magnético<sup>2</sup>.

Experimentalmente los filmes de FeRh son depositados sobre sustratos tales como MgO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, zafiro o silicio. En la actualidad se ha observado que las películas de FeRh crecidas sobre el eje c del zafiro, presentan una temperatura de transición inferior a la de las crecidas sobre MgO puesto que la tensión en el plano favorece al estado FM respecto al AFM<sup>3</sup>. Otro importante resultado experimental es que la fase AFM se vuelve inestable a medida que crece el espesor del film<sup>4</sup>. Obviamente tanto el tipo de sustrato como el espesor del filme son parámetros muy importantes a tener en cuenta.

En este trabajo investigamos el efecto del soporte (MgO) en las propiedades estructurales y magnéticas de filmes delgados de FeRh empleando cálculos de estructura electrónica enmarcados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) usando el código VASP<sup>5</sup>. Ambos sistemas han sido modelados usando superceldas. En el caso de filmes aislados, el slab consiste de 5 monocapas (MC) de FeRh con cada monocapa constituida por átomos de Fe o Rh dependiendo de si la superficie termina en Fe o Rh. En el caso del filme soportado sobre MgO se consideró un sustrato formado de 3 MC de MgO y el mismo número de capas de FeRh.

El análisis de los resultados muestra que las superficies soportadas terminadas en Rh experimentan mayores relajaciones/contracciones que las terminadas en Fe. Comparando ambas terminaciones Fe y Rh para películas aisladas y soportadas, el sistema terminado en Fe es ligeramente más estable que el mismo terminado en Rh en todos los casos. Finalmente, se puede mencionar el efecto del soporte sobre el momento magnético (mm) de los átomos. En el caso de la superficie terminada en Rh, el momento magnético de todos los átomos de Rh disminuye a diferencia de los del Fe que aumentan. Por otro lado, cuando se consideran las superficies terminadas en Fe, todos los mm se incrementan a excepción de los átomos de Fe en contacto con el sustrato, observando un aumento en la magnetización promedio del MgO.

### Referencias

- [1] Ostler, T. A., et. al. "Modeling the thickness of the magnetic phase transition temperature in thin FeRh films", Phys. Rev. (2017), B 95, 064415/7.
- [2] Martí, X., et. al. "Room temperature antiferromagnetic memory resistor", Nat. Mat. (2014), Vol. 13, 367-374.
- [3] Gu, R. Y., et. al. "Dominance of the spin wave contribution to the magnetic phase transition in FeRh", Phys. Rev. B (2005), 72, 012403/4.
- [4] Han, G. C., et. al. "Magnetic stability of ultrathin FeRh films", J. Appl. Phys. (2013), 113, 17C107/3.
- [5] Kresse, G., Hafner, J. "Ab initio molecular dynamics for liquid metals", Phys. Rev. B (1993), 47, 558-561.



## Propiedades vibracionales y termodinámicas de clusters de Pt: *estudio ab initio*

A.S. Maldonado<sup>1,2</sup>, G.F. Cabeza<sup>3\*</sup> y S.B. Ramos<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Depto. de Física, Fac. De Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Neuquén, Argentina

<sup>2</sup> Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas, CONICET-UNCo, Argentina

<sup>3</sup> Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, Instituto de Física del Sur, Depto. de Física, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina

\*gcabeza@uns.edu.ar

**Palabras Claves: nanoclusters Pt, propiedades, DFT**

Los nanoclusters representan un nuevo estado de la materia, con propiedades sensibles a su tamaño y geometría, e intermedias entre las de los átomos aislados y bulk. En particular, el estudio y la comprensión de la estructura y las propiedades de los nanoclusters de metales de transición son actualmente de interés debido a sus importantes aplicaciones en catálisis y almacenamiento magnético.

En este trabajo investigamos empleando métodos de modelado *ab initio*, las propiedades estructurales, cohesivas, magnéticas y vibracionales de Pt<sub>n</sub> (n = 2, 4, 13, 19, 55, 79, 85 y 147), analizando cómo estas propiedades evolucionan hacia el comportamiento sólido. Para la mayoría de los grupos, consideramos como configuraciones iniciales, las geometrías octaédrica e icoosaédrica. Observamos que a medida que aumenta el tamaño del cluster, la energía cohesiva aumenta y el momento magnético se reduce, en correlación con un aumento en la distancia interatómica promedio. Con respecto a las propiedades vibracionales, hay menos información disponible de la bibliografía. Para el caso particular del cluster Pt<sub>13</sub>, nuestro estudio de sus propiedades vibratorias para las configuraciones simétricas Oh y Ih, nos llevó a predecir que estas geometrías son inestables a 0 K; mientras que la configuración de doble capa menos simétrica propuesta por Wang *et al.*<sup>1</sup> posee un espectro vibracional compatible con una configuración estable. A partir de la configuración inicial de Pt<sub>13</sub> Oh y teniendo en cuenta explícitamente los efectos térmicos al realizar dinámica molecular (MD) a temperaturas finitas, se observa que en la primera parte de la simulación de MD, el cluster sigue vibrando alrededor de la geometría Oh en un estado no magnético. Téngase en cuenta que el cluster Pt<sub>13</sub> Oh tiene un momento magnético distinto de cero en T = 0 K. Luego, en un determinado momento de la ejecución de MD, el cluster experimenta una transición hacia configuraciones no simétricas. Para todos los grupos estudiados, la densidad vibracional de los estados muestra un comportamiento muy diferente en comparación con el bulk, con un espectro de frecuencia discreto, que da lugar a desviaciones del modelo de Debye para el calor específico a volumen constante y a bajas temperaturas. Predecimos que las temperaturas de Debye de los grupos son menores a la del bulk<sup>2</sup>.

### Referencias

[1] Wang, L. -L., Johnson, D. D. "Density functional study of structural trends for late-transition-metal 13-atom clusters", Phys. Rev. B, Vol. 75, 235405-10, 2007.

[2] Abel S. Maldonado, Gabriela F. Cabeza, Susana B. Ramos, "Ab initio thermophysical properties of Pt nanoclusters: size and structural effects". Aceptado para publicar en J. of Phys. and Chem. of Solids (2019).



## Modificación del potencial redox del $\text{TiO}_2$ mediante la incorporación de elementos dopantes en la estructura cristalina

C. I. N. Morgade<sup>1,2\*</sup>, S. A. Fuente<sup>1,2</sup>, A. B. Schvval<sup>2</sup> y G. F. Cabeza<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Tecnológica Nacional, FRBB, 11 de Abril 461, Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup> Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física –UNS. Av. Alem 1253. Bahía Blanca. Buenos Aires. Argentina. \*cmorgade@frbb.utn.edu.ar

**Palabras Claves:** potencial redox, titania, elementos dopantes.

### Resumen

La química computacional es una herramienta eficaz para la predicción de las propiedades electrónicas de materiales químicamente alterados. La comprensión de cómo diferentes tipos de dopado modifican las propiedades fotocatalíticas de semiconductores como el  $\text{TiO}_2$  permitiría el desarrollo de nuevos catalizadores para la optimización de reacciones químicas de interés industrial y medioambiental.

La titania es un semiconductor con propiedades fotocatalíticas que se presenta fundamentalmente en la naturaleza en sus estructuras rutilo y anatasa siendo la primera la de mayor estabilidad y la segunda la de mayor actividad. Por otro lado, sistemas de fase mixta han mostrado mayor actividad que los de fase pura. La presencia de estados aceptores o donores en la estructura electrónica de un semiconductor, producto del dopado, modifican las posiciones relativas del mínimo de la banda de conducción (CBM) y del máximo de la banda de valencia (VBM) lo que a su vez se relaciona con sus potenciales de reducción y de oxidación. El conocer cómo cada elemento dopante modifica al catalizador permitiría la selección del método de síntesis más adecuado para la catálisis deseada. Cuanto mayor sea la energía del CBM mayor será el poder reductor y cuanto menor sea la energía del VMB mayor será el poder oxidante del catalizador<sup>1</sup>. En las reacciones fotoquímicas además el paso crucial es la transferencia de electrones desde la banda de valencia a la banda de conducción a partir de la absorción del cuanto de energía adecuado correspondiente al ancho de la banda prohibida (BG). Factores tales como la naturaleza metálica o no metálica del elemento dopante, la posición y la concentración modifican además de los potenciales redox de las bandas, la energía necesaria para la excitación. Por otra parte, es sabido que la hetero-unión de dos catalizadores diferentes, o de un catalizador como la titania en dos polimorfos diferentes, favorece la separación de transportadores de carga y actúa modificando las propiedades óxido-reductoras finales del sistema.

En el presente estudio los cálculos se realizaron utilizando el código VASP<sup>2</sup> dentro del formalismo de la teoría de Densidad Funcional, con la inclusión del coeficiente de Hubbard (DFT + U). Se analizaron los desplazamientos relativos de las respectivas bandas de valencia y conducción en sistemas de fase pura y en sistemas de fase mixta de tamaños de granos grandes y homogéneos dopados intersticial y sustitucionalmente<sup>3</sup>. Dentro de los elementos metálicos estudiados se encuentran el V, el Fe y el Pt, y entre los no metálicos el N, el C y el F.

Los resultados indican que los mayores potenciales de reducción se obtienen mediante el dopado con nitrógeno sustitucional para la anatasa y el nitrógeno intersticial para el rutilo; mientras que en ambos polimorfos el mayor poder oxidante lo presenta el dopado con hierro intersticial. Los estudios de la titania de fase mixta dopada con Fe intersticial corroboran la mayor eficiencia de separación de carga lo que incrementaría la vida media de las mismas y en consecuencia su capacidad catalítica.

### Referencias

- [1] Morgade C. I.N., Cabeza, G. F. "First-principles study of codoping  $\text{TiO}_2$  systems capable of improving the specific surface area and the dissociation of  $\text{H}_2\text{O}$  to generate  $\text{H}_2$  and  $\text{O}_2$ ", *Comp. Mat. Scie*, (2017), 127, 204–210.
- [2] Kresse G., Furthmüller, "Efficient iterative schemes for ab initio total energy calculations using a plane-wave basis set", *J. Phys. Rev. B* (1996), 54, 1169.
- [3] Morgade C.I.N., Castellani N. J., Cabeza G. F. "Theoretical analysis of band alignment and charge carriers migration in mixed-phase  $\text{TiO}_2$  systems". *J. of Comp. Elect.* (2018), 10.1007/s10825-018-1232-7.



## Remediación de aguas con arsénico por tecnologías de oxidación avanzada y adsorción usando $\text{TiO}_2$

S. B. Ulacco<sup>1</sup>, S. A. Fuente<sup>1,2</sup>, I. Lehr<sup>3</sup>, M. del P. Moralejo<sup>1,4</sup>, I. Laguzzi<sup>1</sup>, G. F. Cabeza<sup>2</sup>, M. Sandoval<sup>5</sup>, M. E. Mandolesi<sup>1</sup> C. I. N. Morgade<sup>1,2\*</sup>

*1 UTN FRBB, Argentina*

*2 Dpto. Física-UNS, IFISUR (CONICET), Argentina*

*3 INIEC, Dpto de Ing. Qca., UNS-CONICET, Argentina*

*4 UNS, INQUISUR (CONICET) Dpto. Química- Argentina*

*5 INBIOSUR (CONICET-UNS) Depto. Biología. Bioqca y Farmacia, Argentina*

*\*cmorgade@frbb.utn.edu.ar*

**Palabras Claves:**  $\text{TiO}_2$ , Arsénico, agua potable, remediación.

### Resumen

En diversas partes del mundo, entre ellas el sudoeste de la provincia de Buenos Aires, han sido reportadas aguas subterráneas y superficiales contaminadas con alto contenido de arsénico (As). En la bibliografía es posible hallar información de experiencias de remediación tanto por procesos de adsorción como de oxidación-reducción pero aún sin la efectividad deseada. Sólo el sistema  $\text{TiO}_2/\text{UV}$  (titania/radiación ultravioleta) permite combinar tanto la actividad fotocatalítica como la adsorptiva. Dentro de los sistemas estudiados en ese sentido, los trabajos publicados han sido realizados sobre  $\text{TiO}_2$  estructura anatasa pura o sobre polimorfos mixtos comerciales con predominio de esta fase. De las publicaciones académicas se desprende que la cinética oxido-reducción/ adsorción no es aún bien comprendida siendo muchos de los resultados contradictorios [1]. Por otra parte, una de las dificultades mencionadas en la literatura es la separación del catalizador en su estructura anatasa del agua remediada [2]. A la fecha no han sido reportados a nuestro entender estudios realizados en  $\text{TiO}_2$ , en su estructura 100% rutilo a pesar de ser este polimorfo más económico y de solubilidad acuosa menor que la anatasa. El rutilo por lo expuesto es más fácilmente separable post remediación por precipitación y requiere menor energía para su activación lo que amerita a nuestro entender ser considerado un candidato promisorio para su estudio.

En base a estudios epidemiológicos la Organización Mundial de la Salud (OMS) ha reducido la concentración para el arsénico en el agua potable de 50 a 10  $\mu\text{g L}^{-1}$ , siendo considerado este valor por la mayoría de los países industrializados como el límite permitido para aguas de consumo humano.

Considerando que la especie  $\text{As}^{+3}$ , de mayor toxicidad y complejidad remediativa, puede ser removida a través de procesos oxidativos y que el  $\text{As}^{+5}$  así generado admite ser retirado del medio por adsorción sobre la misma titania, nuestro trabajo se basa en estudiar la eficiencia en la remediación química utilizando  $\text{TiO}_2$  estructura rutilo, en presencia y en ausencia de radiación ultravioleta, cuantificando de este modo, además, las contribuciones relativas de los procesos de adsorción y fotocatalisis. Por otro lado este trabajo compara la eficiencia del sistema  $\text{TiO}_2$  100% rutilo con un sistema  $\text{TiO}_2$  100% anatasa. Los resultados muestran que si bien la remediación por adsorción (oscuridad) sobre titania tiene igual eficiencia en anatasa que en rutilo, la efectividad oxidativa (en presencia de radiación apropiada) es mayor en la anatasa pero la separación del catalizador también es más compleja.

### Referencias

- [1] X. Guana, J. Dub, X. Mengc, Y. Suna, B. Sunc, Q. Hua. Application of titanium dioxide in arsenic removal from water: A review. *J. of Hazardous Mat.* 215– 216 (2012) 1– 16.
- [2] J. Qu, Research progress of novel adsorption processes in water purification: a review, *J. Environ. Sci.-China* 20 (2008) 1–13.
- [3] M.E. Pena, G.P. Korfiatis, M. Patel, L. Lippincott, X.G. Meng, Adsorption of As(V) and As(III) by nanocrystalline titanium dioxide, *Water Res.* 39 (2005) 2327–2337.
- [4] X.H. Guan, J. Ma, H.R. Dong, L. Jiang, Removal of arsenic from water: effect of calcium ions on As(III) removal in the  $\text{KMnO}_4$  Fe(II) process, *Water Res.* 43 (2009) 5119–5128.



## Estudio teórico de las propiedades estructurales y catalíticas de $\text{TiO}_2$ dopada con Fe y su uso en la remoción de arsénico

C. I. N. Morgade<sup>1,2</sup> y G. F. Cabeza<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, IFISUR Av Alem 1253, Bahía Blanca, Argentina

<sup>2</sup> Facultad Regional Bahía Blanca, Universidad Tecnológica Nacional, 11 de abril 461, Bahía Blanca, Argentina, gcabeza@uns.edu.ar

**Palabras claves:** titania, Fe, As, DFT

### Resumen

El arsénico (As) es un elemento tóxico que puede ser fatal para los humanos. En el medio ambiente existe en diferentes estados de oxidación (-III, 0, + III y + V). Sin embargo, en el agua natural, el As se encuentra principalmente en la forma inorgánica que se forma como oxianiones del arsenito trivalente As (III) o arsenato pentavalente As (V) dependiendo del potencial redox y el pH del agua. La contaminación del agua con arsénico es un problema global relacionado principalmente con su amplia presencia en los recursos hídricos utilizados para el consumo humano<sup>1</sup>. El arseniato es más estable, menos móvil y tóxico que el As (III) y se elimina más eficientemente del agua. Por lo tanto, los métodos comunes para la eliminación del arsénico del agua implican la oxidación de las especies As (III) a As (V). Como alternativa a los procedimientos convencionales, diferentes propuestas han atraído una atención considerable en los últimos años, incluida la fotocatalisis heterogénea con dióxido de titanio ( $\text{TiO}_2$ ) y el uso de hierro de valencia cero ( $\text{Fe}^0$ ) conocido como ZVI. En la actualidad, se pueden mencionar dos estudios experimentales, uno reciente de López-Muñoz<sup>2</sup> y otro estudio de Nguyen *et al.* informando el uso de la fotocatalisis con nanopartículas de  $\text{TiO}_2$  y ZVI (NP-ZVI) para la eliminación de As (III) de los sistemas acuosos<sup>3</sup>. Los resultados obtenidos demostraron un aumento en la eficiencia de eliminación de arsénico de la solución acuosa cuando se agregaron partículas de ZVI al reactor. Como la fotocatalisis con ambos sistemas, el  $\text{TiO}_2$  puro y en combinación con hierro, ofrecen ventajas atractivas para el tratamiento del arsénico en sistemas acuosos, es interesante comparar su rendimiento y explorar el posible sinergismo entre ellos. Es por eso que en este trabajo ambos sistemas fueron modelados con el objetivo de determinar los principales parámetros físico-químicos que controlan la actividad y la selectividad hacia la oxidación del arsénico (As). Los cálculos se realizaron utilizando el código VASP<sup>4</sup> dentro del formalismo de la teoría de la densidad funcional, con la inclusión del coeficiente de Hubbard (DFT + U). Las superficies elegidas de la titania son la anatasa  $\text{TiO}_2(101)$  catalíticamente más activa y la de rutilo  $\text{TiO}_2(110)$ . La interacción As/ $\text{TiO}_2$  se modeló depositando 1, 2 ó 4 átomos de  $\text{As}^0$ . Se estudiaron diferentes opciones de dopaje (catiónico e intersticial) de Fe. Las energías de adsorción de As se calcularon en ambas superficies. El estudio se completa con el análisis de la adsorción de diferentes especies arseniosas.

### Referencias

[1] Jain C.K., Ali I., Water Res. 34, 4304–4312.

[2] López -Muñoz M.J., Arencibia A., Segura Y., Raez J.M., Cat. Today 280, 149-154, 2017.

[3] Nguyen T.V., Vigneswaran S., Ngo H.H., Kandasamy J., Choi H.C., Sep. Purif. Technol. 61, 44–50, 2008.

[4] Kresse G., Furthmüller, J. Phys. Rev. B 54, 11169, 1996.



## Estudio teórico del rol de la interface de nanoclusters de Ag<sub>4</sub> depositados sobre TiO<sub>2</sub>(110) y TiO<sub>2</sub>(101)

**A. B. Schvval<sup>1\*</sup>, A. Juan<sup>1</sup>, G. F. Cabeza<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física. Av. Alem 1253. Bahía Blanca. Buenos Aires. Argentina. \* [aschvval@ifisur-conicet.gob.ar](mailto:aschvval@ifisur-conicet.gob.ar)

**Palabras Claves:** Nanoclusters, Anatasa(101), Rutilo(110), Plata(Ag).

### Resumen

Nanoclusters metálicos depositados sobre óxidos como soporte juegan un rol importante para el diseño de catalizadores modelo con aplicaciones en catálisis heterogénea. En general el óxido contribuye a estabilizar las nanopartículas evitando su sinterización. Metales nobles soportados sobre óxidos reducibles como la titania, han mostrado ser eficientes para diferentes reacciones como el Pt para la reacción de WGS (*water gas shift*) o la Ag para la reducción de gases nocivos como los óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>). TiO<sub>2</sub> promete ser un fotocatalizador para una variedad de procesos de remediación debido a su buena actividad fotocatalítica y alta estabilidad química y fotoquímica. En particular, se ha demostrado que el TiO<sub>2</sub> mejora la oxidación de los NO<sub>x</sub><sup>1</sup>.

Al presente hay estudios experimentales de Ag<sub>n</sub> (n < 8) depositada sobre alúmina<sup>2</sup> sin embargo no se ha podido aún dilucidar el estado y estructura de los clusters de Ag. El estudio de la titania como soporte de este sistema es incipiente por eso ha sido elegido en este trabajo con el objetivo de mejorar la performance del catalizador y el conocimiento fundamental de la naturaleza de la actividad catalítica.

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 Ag<sub>4</sub> en configuraciones tetraédrica y planar depositados sobre las superficies estequiométricas de rutilo TiO<sub>2</sub>(110) y anatasa TiO<sub>2</sub>(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 potencial actividad de estos sistemas para evaluar la descomposición de las moléculas NO<sub>x</sub> en moléculas de los gases elementales, N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>.

### Referencias

- [1] Thang Dinh C., Hoogland S., and Sargent E. "Spontaneous and Light-Driven Conversion of NO<sub>x</sub> on Oxide-Modified TiO<sub>2</sub> Surfaces" I & EC research. ACS publications. (2015), 12750-12756.
- [2] Hanna Härelind Ingelstena *et al.* J. of Mol. Cat.s A: Chem. (2009), 102.



## Adsorción de NO<sub>x</sub> sobre Ag soportada en TiO<sub>2</sub>(110) y TiO<sub>2</sub>(101).

**A. B. Schvval<sup>1\*</sup>, G. García<sup>2</sup>, C.I.N. Morgade<sup>1,3</sup>, G. F. Cabeza<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física –UNS. Av. Alem 1253. Bahía Blanca. Buenos Aires. Argentina.

<sup>2</sup>Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados CIEN-UC, Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, Casilla 306, Santiago, Chile.

<sup>3</sup>Universidad Tecnológica Nacional, FRBB, 11 de Abril 461, Bahía Blanca, Argentina.

\* [aschvval@ifisur-conicet.gob.ar](mailto:aschvval@ifisur-conicet.gob.ar)

**Palabras Claves:** Titania, Dopado, Plata (Ag), Adsorción de NO<sub>x</sub>.

### Resumen

El dióxido de titanio o titania, TiO<sub>2</sub>, es un óxido metálico semiconductor con diferentes estructuras cristalinas que tiene buenas propiedades fotocatalíticas, adecuadas para la aplicación de este material en sistemas que permitan disminuir la contaminación ambiental. Entre los principales contaminantes de emisiones de automóviles pueden citarse CO, hidrocarburos, NO<sub>x</sub> y plomo. Se ha demostrado que los óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>) son la principal causa de la lluvia ácida, el smog, la formación de ozono a nivel del suelo y también de la formación de peroxiacetilnitratos (PAN)<sup>1</sup>. Debido a todos estos efectos nocivos, el control y la eliminación de las emisiones de NO<sub>x</sub> se han convertido en un tema crítico que atrae una mayor atención en las últimas décadas. De hecho, el óxido nítrico (NO) representa el 95% de las emisiones de NO<sub>x</sub> de fuentes no naturales, por lo que la eliminación de NO es particularmente importante para el tratamiento de NO<sub>x</sub>. Las moléculas NO<sub>x</sub> que forman parte del aire contaminado pueden ser descompuestas en su interacción con titania. Así, la utilización de titania en las condiciones adecuadas podría ayudar a bajar los niveles de contaminación del aire.

Los estudios computacionales de sistemas involucrados en reacciones químicas permitidos por la capacidad de cálculo actual brindan una herramienta complementaria a la investigación experimental. En este trabajo utilizamos un método de cálculo ab initio encuadrados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT + U) para estudiar las superficies estequiométricas de anatasa TiO<sub>2</sub>(101) y rutilo TiO<sub>2</sub>(110) dopadas con distintas configuraciones geométricas de plata (Ag)<sup>2</sup> y su influencia en la adsorción y disociación de NO y NO<sub>2</sub>. Se evaluaron propiedades estructurales, electrónicas (DOS) y efectos de transferencia de carga (Bader) para la adsorción de los óxidos de nitrógeno en Ag/TiO<sub>2</sub><sup>3</sup>.

Los resultados obtenidos de los diferentes sitios de adsorción estudiados, indican que el dopado con plata, tanto en fase anatasa como en fase rutilo, mejora la capacidad catalítica cuando se la coloca superficialmente. Además, se observa que el NO se adsorbe efectivamente en la titania de manera inclinada, con el átomo de N ubicado en posiciones coordinadas con átomos de Ti. En el caso del gas NO<sub>2</sub>, éste también es adsorbido en la superficie de la titania, en cercanías al átomo de Ag y con el átomo de N orientado hacia la superficie. Ambas superficies dopadas eliminarían de esta manera los NO<sub>x</sub> del aire. Con respecto a los casos de Ag<sub>4</sub> con geometría tetraédrica, los resultados apuntan al cluster sobre la superficie de anatasa como el más estable y prometedor para la adsorción de NO. Además, son alentadores los resultados esperados para el caso de NO<sub>2</sub>.

### Referencias

- [1] Zhang J.L, Ayusawa T, Minagawa M., Kinugawa K., Yamashita H, Matsuoka M, Anpo M, "Investigations of TiO<sub>2</sub> Photocatalysts for the Decomposition of NO in the Flow System". J. Catal. (2001), 198, 1–8.
- [2] Meili Guo, Jiulin Du, "First-principles study of electronic structures and optical properties of Cu, Ag, and Au-doped anatase TiO<sub>2</sub>". Physica. B. (2012). 407 1003–1007.
- [3] Mengxi Xu, Yunhai Wang, Jiafeng Geng, Dengwei Jing, "Photodecomposition of NO<sub>x</sub> on Ag/TiO<sub>2</sub> composite catalysts in a gas phase reactor" Chem. Engineering Journal. (2017), 307, 181–188.



## Construcción de Volúmenes Realistas a partir de Imágenes Tomográficas para Cálculos Dosimétricos

**Fabrizio Matias y Walter R. Cravero**

*Grupo de Física de Radiaciones, Instituto de Física del Sur, IFISUR y  
Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur,  
12 de octubre 1865, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina  
\*Carletice@gmail.com*

**Palabras Claves:** tomografía computada, Hounsfield number, dosimetría, monte carlo

### Resumen

El cálculo dosimétrico para simulación de tratamientos de radioterapia comienza con el diagnóstico y la definición del volumen a tratar por medio de la adquisición de imágenes médicas. Estas imágenes usualmente se transforman en un stack de tomografías computadas digitales en formato DICOM[1]. El cálculo dosimétrico requiere contar con la información de densidad y número atómico efectivo de cada voxel del conjunto que constituye el volumen a irradiar. En este trabajo presentamos la metodología para construir volúmenes realistas, a partir de stacks de tomografías computadas de pacientes anónimos, partiendo del stack de tomografías y concluyendo en el armado de los archivos de geometría voxelizada para ser utilizados en el Código de Monte Carlo PENELOPE[2-3]. Si bien este trabajo usualmente es realizado por el planificador de tratamientos comerciales empleados en los servicios de Radioterapia, en este trabajo se realiza utilizando software de código abierto, disponible sin costo, a fin de ser empleado en un sistema de verificación independiente[4-5].

### Referencias

1. Kahn CE Jr, Carrino JA, Flynn MJ, Peck DJ, Horii SC. DICOM and radiology: past, present, and future. *Journal of the American College of Radiology* 2007; 4:652-657. DOI 10.1016/j.jacr.2007.06.004
2. Francesc Salvat, José M. Fernández-Varea, Josep Sempau, PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Barcelona, 2009.
3. Sempau J, Badal A and Brualla, L, [Med Phys](#). 2011 Nov;38(11):5887-95. Doi: 10.1118/1.3643029.
4. Schneider CA, Rasband WS, Eliceiri KW (2012). "NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis". *Nat Methods*. 9 (7): 671–675. doi:10.1038/nmeth.2089.
5. A. Rucci et al. "Use of IAEA's phase-space files for virtual source model implementation: Extension to large fields", *Physica Medica* **32**, pp. 1030-3 (2016).



## Wavelets Sturmianas como herramienta para el análisis de datos de eye tracking

\*Marcos Meo<sup>1</sup>, Leonardo Dimieri<sup>1,2</sup>, Jessica Del Punta<sup>1,3</sup>, Gustavo Gasaneo<sup>1,2</sup>, Ugo Ancarani<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Neufisur, Instituto de Física del Sur, (IFISUR, UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina

<sup>2</sup>Centro Integral de Neurociencias Aplicadas, Blandengues 192, (8000) Bahía Blanca, Argentina

<sup>3</sup>Departamento de Matemática, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina

<sup>4</sup>Théorie, Modélisation, Simulation, SRSMC, UMR CNRS 7565, Université de Lorraine, 57078 Metz, France

E-mail: marcos.meo@uns.edu.ar

### Resumen

El estudio y análisis de los datos que resultan de seguimiento de los movimientos oculares de una persona que realiza una tarea de tipo cognitivo permite entender algunos aspectos del funcionamiento del cerebro. La información cognitiva puede correlacionarse con la forma en que los ojos realizan los movimientos, con el número de las sacadas y con la forma en que la persona explora la imagen que está mirando.

En esta contribución presentamos una herramienta para analizar dicha información basada en el uso de funciones de escaleo y wavelets definidas en términos de Funciones Sturmianas Generalizadas. Realizamos una descomposición de la señal en una relación de dos escalas empleando funciones de base construidas en términos de un modelo que representa apropiadamente la dinámica ocular. Esta elección permite analizar la información cognitiva de una manera eficiente.



## **Interacción entre diferentes ácidos grasos libres y el receptor de acetilcolina nicotínico inserto en una bicapa lipídica.**

**Diego Obiol<sup>1</sup>, María Julia Amundarain<sup>1</sup>, Omar Jaure<sup>1</sup>, Fernando Zamarreño<sup>1</sup>, Juan Viso<sup>1</sup>, Silvia Antollini<sup>2</sup>, Marcelo Costabel<sup>1\*</sup>**

*1Grupo de Biofísica, Departamento de Física-IFISUR, Universidad Nacional del Sur (UNS-CONICET), Bahía Blanca, Argentina.*

*2INIBIBB, Departamento de Biología, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional del Sur (UNS-CONICET), Bahía Blanca, Argentina.*

marcelo.costabel@gmail.com

**Palabras Claves: Receptor, Acetilcolina, Ácido graso libre, Dinámica molecular**

### **Resumen**

El receptor nicotínico de acetilcolina (nAChR) es bloqueado de manera no competitiva por ácidos grasos libres (AGL) y el sitio de acción podría ocurrir en la interfaz lípido-AChR. El isomerismo y la posición del doble enlace se consideran cruciales para este mecanismo de bloqueo. El objetivo de este trabajo consistió en realizar dinámica molecular (DM) para un sistema consistente de un modelo del nAChR inserto en una bicapa lipídica compuesta por colesterol, palmitoil oleoil fosfatidilamina y palmitoil oleoil fosfatidilcolina para evaluar la influencia de diferentes AGL sobre los cambios conformacionales del nAChR. Los parámetros que evalúan la calidad del modelo como molpdf, DOPE, GA341, QMEAN y ZSCORE se mantuvieron o mejoraron con respecto al AChR de *Torpedo marmorata* (2BG9) publicado en el *Protein Data Bank*. A este sistema, minimizado y equilibrado, le realizamos tres reemplazos, en sitios anulares y no anulares del receptor, con uno de los siguientes AGL: cis-18:1  $\omega$ -6, cis-18:1  $\omega$ -9, cis-18:1  $\omega$ -11, cis-18:1  $\omega$ -13 o trans-18:1  $\omega$ -9. Obtuvimos un total de 10 sistemas, más el sistema de control formado únicamente por el modelo deL AChR incluido en la bicapa lipídica. Los resultados de los cálculos de la desviación cuadrática media (RMSD), la fluctuación cuadrática media (RMSF), el radio de giro de la proteína, el potencial electrostático a lo largo de la bicapa lipídica, el espesor de la bicapa lipídica y el área por lípido demostraron la estabilidad del sistema a lo largo de toda la trayectoria de la DM.

Los resultados preliminares muestran una buena correlación con estudios previos para el ácido oleico (cis-18:1  $\omega$ -9) localizado cerca de los segmentos transmembrana 4 y ácido eláidico (trans-18:1  $\omega$ -9) localizado cerca de los segmentos transmembrana 4 y confirman que la posición e isomerismo del doble enlace de los AGL influyen sobre la conformación de AChR.



## **Péndulo de torsión esférico bajo efecto Leidenfrost**

**Laureano Ortellado**

*Dpto. de Física, Universidad Nacional Del Sur - IFISUR CONICET, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*

*E-mail: [laureano.ortellado@uns.edu.ar](mailto:laureano.ortellado@uns.edu.ar)*

**Efecto Leidenfrost, Disipación Hidrodinámica.**

### **Resumen**

Cuando una pequeña gota de líquido se deposita sobre una superficie con una temperatura significativamente mayor al punto de ebullición del líquido, en general se forma una interface de vapor de baja conductividad térmica que puede reducir drásticamente su velocidad de evaporación; bajo estas condiciones, la gota puede levitar sobre la superficie caliente y volverse extremadamente móvil debido al efecto lubricante de la capa de vapor. Este fenómeno, descubierto hace alrededor de 250 años, es conocido como efecto Leidenfrost [1-3].

En este trabajo se analizó el rol de este fenómeno sobre la disipación hidrodinámica de un péndulo de torsión esférico sumergido en un baño de nitrógeno líquido (LN<sub>2</sub>). A diferencia de la disipación observada bajo condiciones de equilibrio térmico entre el péndulo y el baño de LN<sub>2</sub>, en presencia del efecto Leidenfrost se encontró una fuerte reducción en el arrastre hidrodinámico; el fenómeno puede describirse satisfactoriamente mediante un modelo teórico que contempla tanto contribuciones inerciales como interacciones hidrodinámicas de largo alcance.

[1] J. G. Leidenfrost, *De Aquae Communis Nonnullis Qualitatibus Tractatus* (1756).

[2] J. G. Leidenfrost, *Intl. J. Heat and Mass Transfer* 9, 1153 (1966).

[3] U. Vakarelski, J. O. Marston, D. Y. C. Chan, S. T. Thoroddsen, *PRL* 106, 214501 (2011).



## Estudio DFT de formación de vacancias de oxígeno en óxidos mixtos: $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ .

G. S. Otero<sup>1\*</sup>, G. Zimicz<sup>1</sup>, F. Prado<sup>1</sup>, P. Lustemberg<sup>2</sup> y M. V. Ganduglia Pirovano<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física del Sur (IFISUR), Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina

<sup>2</sup> Instituto de Física Rosario (IFIR-CONICET) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, UNR, S2000EKF - Rosario, Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (ICP-CSIC), Madrid E-28049, España

\* Email: [guadalupe.otero@uns.edu.ar](mailto:guadalupe.otero@uns.edu.ar)

**Palabras Claves:** Celdas de combustible,  $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ , DFT+U, Vacancias de Oxígeno.

### Resumen

Los óxidos mixtos del sistema  $CeO_2$ - $ZrO_2$  son de interés debido a su papel catalítico en la producción de  $H_2$ , reformado y oxidación parcial de hidrocarburos. Se ha demostrado que el dopaje del óxido de cerio con Zr mejora las propiedades redox y la estabilidad térmica del óxido. Una aplicación tecnológica de este tipo de materiales es como electrodo de oxidación (ánodo) en celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia (IT-SOFC). Resultados anteriores indican que en la solución sólida de  $Ce_{1-x}Zr_xO_2$  disminuyen los valores de energía de reducción del “bulk” en comparación con los de la ceria pura<sup>1</sup>.

Para comprender los motivos de esta mejora, hemos realizado un análisis sistemático de DFT + U<sup>2</sup> (*Density Functional Theory* con corrección de Hubbard) del “bulk” y la superficie (111) del óxido  $Ce_{1-x}Zr_xO_2$  con el código VASP<sup>3,4</sup>. En particular hemos estudiado el sistema en el rango  $0 \leq x \leq 0.2$ , que corresponde a muestras con estructura cúbica tipo fluorita. En un primer paso, hemos optimizado la posición de los átomos de Zr. Se calculó la energía superficial, para la superficie  $Ce_{1-x}Zr_xO_2$  (111). Hemos encontrado que la estructura más estable no es con el Zr en la superficie, sino las tricapas más internas de la superficie. Además, los resultados no muestran una preferencia energética por una distancia específica entre los átomos de Zr, ni en la superficie ni en el “bulk”, lo que indica una distribución aleatoria de dopantes.

Para entender los procesos involucrados en la reducción de óxido, hemos calculado las energías de formación de vacancias de oxígeno, su dependencia con la relajación de la red y la localización de los dos  $Ce^{3+}$  que se originan al quitar un átomo de oxígeno de la red.

### Referencias

<sup>1</sup> M.G. Zimicz, “In-situ XANES and XPD studies of NiO/Ce<sub>0.9</sub>Zr<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub> IT-SOFCs anode nanomaterial as catalyst in the CPOM reaction” *Applied Catalysis A*, General 542 (2017) 296–305

<sup>2</sup> S. L. Dudarev “Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study” *Phys. Rev. B* 57, (1998) 1505

<sup>3</sup> G. Kresse; “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set” *Phys. Rev. B* 54 (1996) 11169-11186

<sup>4</sup> G. Kresse; “Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set” *Comput. Mater. Sci.* 6 (1996) 15-50



## Efecto de la adsorción de Rh y Li en las propiedades fisicoquímicas de SWCNT (8,0): estudio DFT

Mauro Patrignani<sup>1</sup>, Julian Villarreal<sup>1,2</sup>, Hernan Seitz<sup>1,2</sup>, Romina Luna<sup>1,2</sup>, Paula Jasen<sup>1,2</sup>.

<sup>1</sup> Universidad Nacional del Sur, Dpto. de Física, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup> Universidad Nacional del Sur, CONICET, IFISUR, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.

pjasen@uns.edu.ar

**Palabras Claves:** nanotubo de carbono, semiconductor, magnetismo, función trabajo

### Resumen

Desde que fueron descubiertos por Iijima en el año 1991, los los nanotubos de carbono han generado un enorme interés en la comunidad científica [1]. Numerosas empresas observan con atención los avances científicos que se producen en esta área, por las ventajas competitivas y económicas que supondría la incorporación de nanotubos de carbono en el desarrollo de sus productos[2-3]. Actualmente hay un creciente auge de investigación sobre CNT semiconductores, debido a que pueden ser aplicados en diversas áreas. Particularmente el nanotubo de carbono de pared simple (SWCNT) (8,0) es el nanotubo semiconductor de menor diámetro, con lo cual tiene propiedades y aplicaciones diferentes al resto. Sus propiedades pueden ser modificadas mediante la adsorción de diferentes metales [4-7 ], alcalinos o de transición. El objetivo de este trabajo es estudiar un sistema de alto interés tecnológico como son los nanotubos de carbono (CNT). En este trabajo se utilizaron cálculos DFT implementados por el paquete VASP [8], para el estudio del efecto del Li y Rh en las propiedades SWCNT(8,0). Para el modelado de dicho nanotubo se utilizaron dos celdas unidades del mismo (64 átomos) y un espaciado entre un nanotubo y su imagen de 20 Å. Los resultados obtenidos muestran que tanto el átomo de Li como el átomo de Rh se adsorben en el centro de un hexágono del nanotubo. La energía de adsorción de Li (Rh) es -1.58 eV (-2.62 eV). Sin embargo, el efecto que produce cada elemento es totalmente diferente. El SWCNT (8,0) es no magnético y tiene un ancho de banda prohibida ( $E_g$ ) de 0.58 eV. El Litio no modifica sus propiedades magnéticas, pero si reduce considerablemente  $E_g$ , un 83 % aproximadamente. Por otra parte, el Rh induce magnetismo ( $\sim 1 \mu_B$ ) en el nanotubo, pero la reducción en  $E_g$  no es tan significativa como en Li ( $\sim 21$  %). Otra magnitud calculada es la función trabajo (WF), en el nanotubo pristino tiene un valor de 4.39 eV. Los resultados obtenidos muestran que ambos metales reducen dicha magnitud, en el caso Li un 21 % y para Rh un 63 %.

### Referencias

[1] S. Iijima; Nature 354 (1991) 56–58.

[2] P. R. Bandaru; J Nanosci Nanotechno 7 (2007) 1–29.

[3] L. Brownlie, J. Shapter; Carbon 126 (2018) 257-270.

[4] M. Yoosefian; Appl. Surf. Sci. 434 (2018) 134-141

[5] M. Yoose, N. Etminan; RSC Adv. 6 (2016) 64818–64825.

[6] I. Suarez-Martinez, C.P. Ewels, X. Ke, G. Van Tendeloo, S. Thiess, et al.; ACS Nano 4 (2010) 1680–1686

[7] K. J. Li, Q. Y. Shao, J. Zhang, X.H. Yao; Mod. Phys. Lett. B 30 (2016) 1650220

[8] <https://www.vasp.at/>



## **Análisis en la escuela de las primeras ideas en ciencia: el experimento para determinar la edad de la tierra realizada por el Conde de Buffon**

**M M Pincelli<sup>1</sup>, M R Prat<sup>2</sup>, G Lescano<sup>2</sup>, M del C Formichella<sup>3</sup>, M Brustle<sup>3</sup> y S Otranto<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Dpto. de Física Univ. Nac. del Sur (UNS), Instit. de Física del Sur (IFISUR) CONICET, Av. Alem 1253 B8000CP Bahía Blanca, Argentina

<sup>2</sup> Dpto. de Química Univ. Nacional del Sur (UNS), Inst. de Química del Sur (INQUISUR) CONICET, Av. Alem 1253 B8000CP Bahía Blanca, Argentina

<sup>3</sup> Colegio Victoria Ocampo, Brown 236, B8000LQF Bahía Blanca, Argentina

**Palabras clave: aprendizaje significativo, termodinámica, modelo científico**

Este trabajo propone una actividad basada en la primer experiencia concebida por el hombre para estimar la edad de la Tierra. Se trata de una adaptación áulica del experimento realizado a finales del siglo XVIII por el Conde de Buffón. El estudio asumía que la Tierra en su etapa de formación era una esfera de hierro incandescente y, través del estudio de los tiempos de enfriamiento para esferas de distintos diámetros, permitió estimar una edad para la Tierra de aproximadamente 78000 años [1]. La presente propuesta constituye una emulación de la experiencia original que tiene en cuenta la factibilidad de su realización en el aula, sin perder rigurosidad conceptual. En reemplazo de las esferas de hierro incandescente, se utilizaron esferas navideñas rellenas con arena y agua caliente y se estableció el rango de validez de esta figuración mediante un estudio termodinámico [2]. La actividad no solo constituye un ejemplo práctico del concepto de extrapolación lineal sino que acerca a los alumnos a la idea de que los grandes interrogantes de la ciencia primeramente fueron abordados a través de modelos simples.

[1] Badash L. Sci. Am. 262 (1989) 90-6.

[2] M M Pincelli, M R Prat, G M Lescano, M del C Formichella, M Brustle and S Otranto *Phys. Educ.* 53 (2018)



## Adsorción de diferentes especies de dopamina sobre óxido de grafeno: un estudio DFT

A. C. Rossi Fernández <sup>1</sup>, N. F. Domancich <sup>2</sup>, L. A. Meier <sup>2</sup>, S. A. Fuente <sup>2</sup>, N. J. Castellani <sup>3\*</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Química del Sur (INQUISUR), Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup> Instituto de Física del Sur (IFISUR), Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

<sup>3</sup> Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina. castella@criba.edu.ar

**Palabras Claves:** dopamina, grafeno, adsorción, DFT

### Resumen

Actualmente uno de los métodos más utilizados para producir láminas de grafeno con fines tecnológicos se basa en la reducción de óxido de grafeno (GO) mediante métodos térmicos o químicos. Las láminas de GO presentan en su superficie predominantemente grupos epoxi e hidroxilo y en los bordes se encuentran también grupos carbonilo y carboxilo [1]. Entre los reductores químicos utilizados, se demostró que la dopamina actúa menos severamente que otros como la hidracina o NaBH<sub>4</sub> [2].

En el presente trabajo se estudia teóricamente la adsorción de diferentes formas de la dopamina (DA): dopamina neutra (NDA), dopamina zwitteriónica (ZDA), dopamina protonada (DAP) y dopamina desprotonada (DADP), sobre una superficie modelo de GO con un grupo epoxi o un grupo hidroxilo en el plano basal de este material. Los cálculos se realizaron en el marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT), empleando el programa VASP (Vienna Ab-initio Simulation Program). Se incluyeron efectos dispersivos mediante el método DFT-D2 de S. Grimme. Las geometrías estudiadas corresponden a diferentes acercamientos de las especies de DA al grupo epoxi o al grupo hidroxilo del GO, aproximándose a través del anillo aromático, del grupo amino o de los grupos hidroxilos de la molécula de DA.

La adsorción resulta ser siempre exotérmica en el caso de ZDA y DAP, pero en el caso de NDA y DADP se observan estados de tipo endotérmico. En general las moléculas de ZDA y DAP son mucho más reactivas que las de NDA y DADP. Cuando el grupo amino de ZDA o DAP está próximo al epoxi se produce la ruptura de un enlace N-H y la formación de un hidroxilo superficial. Por otra parte el acercamiento del grupo amino de ZDA o DAP a un hidroxilo termina en la formación de una molécula de agua. Dicha molécula queda atrapada en las cercanías de ZDA o DAP desprotonadas, mediante la formación de uniones puente de hidrógeno. Si bien hay una importante contribución de fuerzas dispersivas en la estabilización de todas las moléculas, en el caso de ZDA y DAP la fuerza del enlace con la superficie es compatible con la presencia de una atracción coulombiana adsorbato-substrato, como consecuencia de una transferencia electrónica de la molécula hacia el substrato.

### Referencias

[1] S. Pei, H. M. Cheng; Carbon 50 (2012) 3210-3228.

[2] X. Hu. y col.; J. Appl. Polym. Sci. 131(2014) 39754.



## La adsorción de diferentes especies de dopamina sobre Ag(111): un estudio teórico del grado de protonación y del efecto del campo eléctrico

A. C. Rossi Fernández <sup>1</sup>, N. F. Domancich <sup>2</sup>, L. A. Meier <sup>2</sup>, N. J. Castellani <sup>3\*</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Química del Sur (INQUISUR), Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup> Instituto de Física del Sur (IFISUR), Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.

<sup>3</sup> Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina. castella@criba.edu.ar

**Palabras Claves:** dopamina, Ag(111), adsorción, DFT

### Resumen

La dopamina (DA) es una catecolamina cuyas moléculas se enlazan a receptores superficiales de las células en humanos y mamíferos, activándolos. Como neurotransmisor cumple un importante papel fisiológico en los sistemas nervioso central, renal y hormonal. Por lo tanto es de sumo interés médico y farmacológico estudiar las interacciones en las que esta molécula biológica está involucrada. Experimentalmente se sabe que, de acuerdo al pH del medio solvente, pueden presentarse diferentes formas de esta catecolamina, incluyendo las especies neutra, zwitteriónica, catiónica y aniónica. Recientemente se han publicado diversas propuestas para la detección de DA basadas en voltametría cíclica y espectroscopía Raman realizada en superficie. En este último caso el empleo de partículas coloidales de Ag como sustrato para la adsorción de DA permite una mejor detección de la molécula.

En el presente trabajo estudiamos teóricamente la adsorción de las especies neutra (NDA), zwitteriónica (ZDA), protonada (PDA) y desprotonada (DPDA) sobre la cara (111) de Ag. Esto se efectuó dentro del formalismo de Density Functional Theory (DFT) tal como está implementado en el Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP). Los slabs que se repiten en la dirección normal y que representan la superficie de Ag(111) contienen cuatro capas de átomos y una región vacía adecuadamente espaciada. En la optimización geométrica se dejaron relajar las especies adsorbidas y la primera capa de átomos de Ag. Como orientación inicial para la adsorción de cada una de las especies mencionadas se adoptó aquella en que su anillo aromático se ubica paralelamente a la superficie de Ag.

Los cálculos muestran que la adsorción de PDA es un proceso más favorable que la de ZDA, mientras que la adsorción de DPDA está altamente desfavorecida en comparación con la de ZDA. La interacción adsorbato-sustrato se evaluó calculando el cambio sufrido por la densidad de carga electrónica de los fragmentos intervinientes y realizando un análisis de las cargas atómicas mediante el método DEEC6. Los resultados señalan que se produce una importante reorganización de la carga electrónica. Mientras las especies neutra, zwitteriónica y protonada adquieren una carga neta positiva, la especie desprotonada posee una carga neta negativa. También se estudió el efecto de un campo eléctrico homogéneo en la adsorción de las diferentes especies de DA. En particular se observó que un campo eléctrico negativo estabiliza el sistema ZDA/Ag(111) y que la molécula de ZDA resulta más positivamente cargada. Por otro lado, un campo eléctrico positivo desestabiliza dicho sistema, resultando una molécula de ZDA menos positivamente cargada.



## Estudio de la cinética de sinterizado de polvos nanoestructurados de $Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_2$ obtenidos por el método de gelificación-combustión

María G. Zimicz<sup>(1)\*</sup>, Analía L. Soldati<sup>(2)</sup>, Susana A. Larrondo<sup>(3)</sup> y Fernando D. Prado<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Depto. De Física- Universidad Nacional del Sur, e Instituto de Física del Sur (IFISUR)-CONICET, Av. Alem N° 1253, Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina.

<sup>(2)</sup> CONICET, Grupo Caracterización de Materiales, CAB-CNEA, Bustillo 9500, Bariloche, Argentina.

<sup>(3)</sup> CINSO (Centro de Investigaciones en Sólidos), CITEDEF-UNIDEF-CONICET, J.B. de La Salle N° 4397, Villa Martelli, Pcia. de Buenos Aires Argentina

\*E-mail: mgzimicz@ifisur-conicet.gob.ar

**Palabras Claves:** Cinética de sinterizado, Dilatometría,  $Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_2$ , SOFC.

### Resumen

Los óxidos mixtos basados en  $CeO_2$  son un elemento importante de muchos sistemas catalíticos para oxidación [1–2], por lo cual han recibido una considerable atención en la formulación de materiales anódicos para celdas de combustible de óxido sólido que operan con hidrocarburos (SOFCs) [3]. El material anódico debe cumplir requerimientos especiales tales como poseer microestructura estable, alta conductividad iónica y electrónica y alta actividad catalítica a temperaturas intermedias [4]. Un aspecto crítico en el uso de óxidos mixtos de Ce-Zr-O es la estabilidad morfológica. Una etapa de procesamiento que posee gran influencia en la microestructura es el tratamiento térmico utilizado para fijar el material anódico al electrolito. Por esta razón, es importante conocer la cinética de sinterizado del material cerámico.

Los polvos de  $Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_2$  fueron obtenidos mediante el método de gelificación –combustión siguiendo rutas estequiométricas utilizando glicina (muestra GS) y lisina (muestra LS), y una ruta no estequiométrica utilizando glicina (muestra GN5). Se analizó el proceso de sinterizado de los óxidos por medio de las técnicas de dilatometría isotérmica en etapas (Stepwise Isothermal Dilatometry, SID) y dilatometría a velocidad de calentamiento constante (Constant Heating Rate, CHR). La evolución del tamaño de cristalita con la temperatura fue analizada por difracción de rayos X con radiación sincrotrón, y se analizó la morfología de los óxidos mediante microscopía electrónica de barrido y de transmisión. Si bien las muestras de  $Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_2$  poseen la misma composición y estructura cristalina, el comportamiento durante el sinterizado resultó muy diferente para cada sólido, evidenciando que el proceso de sinterizado es altamente dependiente de la morfología inicial de los polvos. Menores tamaños de partícula llevan a una menor temperatura de inicio de densificación. Se concluyó que el proceso de sinterizado de los óxidos de  $Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_2$  nanoestructurados es controlado principalmente por difusión por borde de grano para temperaturas por debajo de 1100°C – 1300°C, dependiendo de la morfología inicial de las muestras. A altas temperaturas, la difusión por borde de grano y la difusión en bulk se convierten en mecanismos paralelos que controlan el sinterizado.

### Referencias

- [1] A. Trovarelli, M. Boaro, E. Rocchini, C. de Leitenburg, G. Dolcetti; J. of Alloys and Comp. 323–324 (2001) 584–591.
- [2] R. Di Monte, J. Kaspar; Catalysis Today 100 (2005) 27–35.
- [3] D.G. Lamas, M.D. Cabezas, I.O. Fábregas, N.E. Walsøe de Reça, G.E. Lascalea, A. Kodjaian, M.A. Vidal, N.E. Amadeo, S.A. Larrondo; ECS Transactions 7 (1) (2007) 961–970.
- [4] A.J. Jacobson; Chemistry of Materials 22 (2010) p. 660-674.



## Ondas de choque en materiales poliméricos

**Zorzi Ruggiero E**

*Departamento de Física,*

*Dpto. de Física, Universidad Nacional Del Sur - IFISUR CONICET, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*

*E-mail: [enzoZR@gmail.com](mailto:enzoZR@gmail.com)*

**Palabras Claves:** polímeros, dinámica molecular, LAMMPS

### Resumen

En los últimos años se ha observado que algunos materiales basados en polímeros muestran una resistencia al impacto que puede ser muy superior a materiales convencionales basados en metales o cerámicos, con la ventaja adicional de tener baja densidad y transparencia controlable [1]. A pesar de que todavía no se lograron determinar fehacientemente los principios microscópicos que le otorgan dicha resistencia al impacto, se considera que su gran capacidad de disipación proviene de la combinación de moléculas con dominios rígidos (vítreos o cristalinos) y regiones blandas (amorfos), que resultarían ideales para disipar y atenuar las ondas de choque [2]. Estas dos propiedades son cruciales para disipar la energía del impacto en un rango de velocidades de deformación que puede alcanzar hasta 10 órdenes de magnitud.

En este trabajo se utiliza el software libre de dinámica molecular LAMMPS para estudiar la respuesta de polímeros amorfos ante ondas de choque [3]. Con ese fin se generan fundidos de cadenas lineales donde las partículas interaccionan con potenciales del tipo Kremer-Grest, para posteriormente generar ondas de choque comprimiendo el sistema a distintas velocidades [4].

### Referencias

- [1] J. Lee, J. P. Singer, M. Retsch, G. Saini, T. Pezeril, K. A. Nelson, E. L. Thomas; *Nat. Commun* 3 (2012) 1164.
- [2] B. Arman, A. S. Reddy, G. Arya; *Macromolecules* 45 (2012) 3247.
- [3] Simulador de dinámica molecular LAMMPS; <http://lammps.sandia.gov>.
- [4] K. Kremer, G. Grest; *J. Chem. Phys* 92 (1990) 5057.