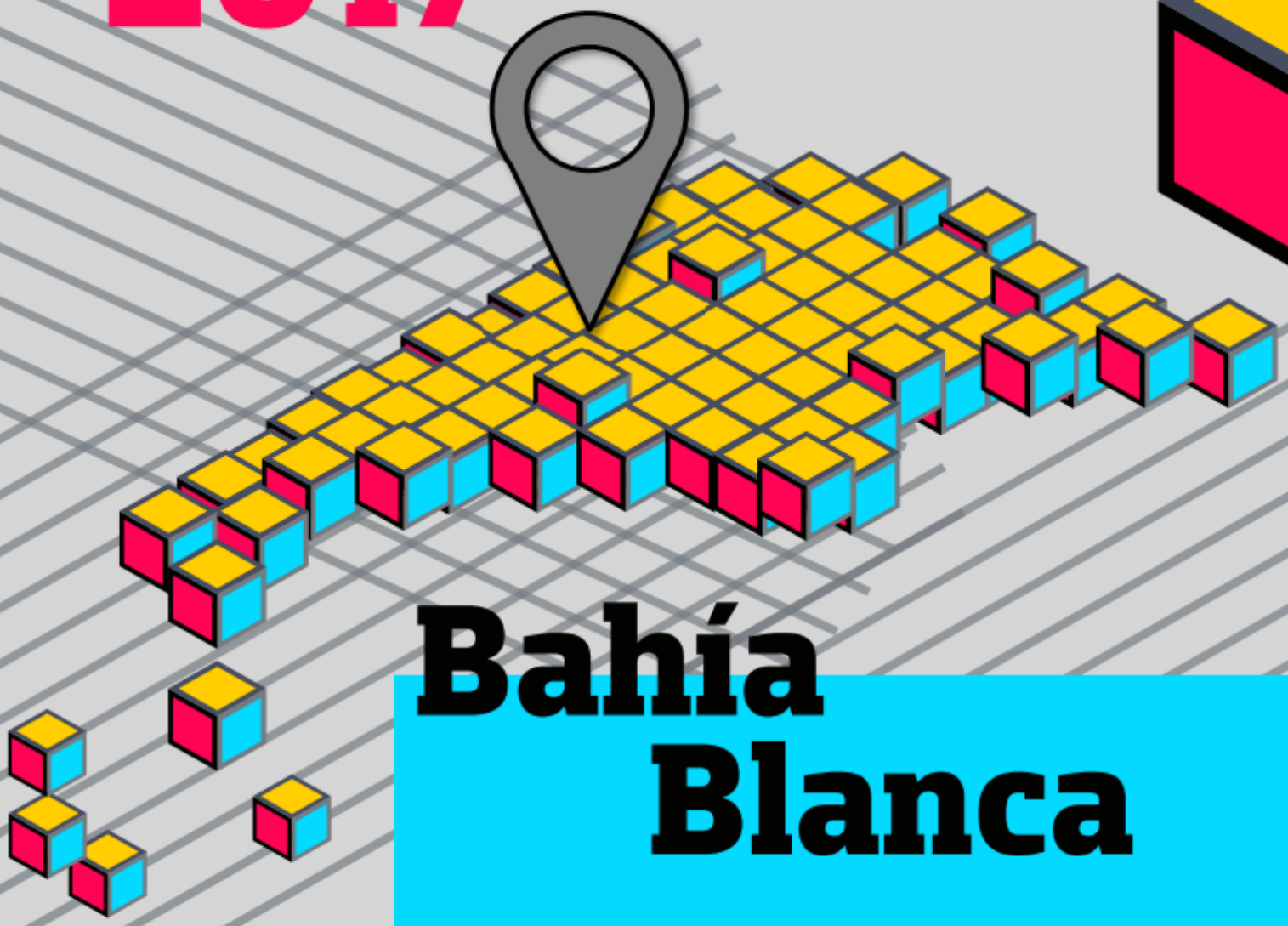
VII Reunión Nacional de Sólidos

22 al 24 Noviembre

2017



Bahía Blanca

Libro de Resúmenes

VII Reunión Nacional de Sólidos

22 de Noviembre al 24 de Noviembre de 2017

Bahía Blanca, Buenos Aires

Argentina

Prefacio

Estimados colegas, es la primera vez que Bahía Blanca es sede de este tipo de reunión y es nuestra intención darles la bienvenida a nuestra ciudad a todos los participantes de la **VII Reunión Nacional de Sólidos**.

Sólidos 2017 tiene como primer objetivo fomentar un ambiente de discusión y colaboración entre distintos grupos de investigación que desarrollan su actividad en el país y realizar una puesta al día de los avances científicos más recientes en su especialidad, la *física de estado sólido*.

La Física del Estado Sólido es la base de la tecnología actual y permite entender la correlación entre las propiedades físicas macroscópicas y las características microscópicas de los materiales, con base en modelos y aproximaciones aplicados a los cristales. En los últimos años la física del estado sólido se ha expandido rápidamente en la implementación de nuevas teorías y creación de nuevos métodos de medición; el hallazgo de nuevos materiales con aplicaciones tecnológicas con propiedades excepcionales para una aplicación específica, son un testimonio de los progresos en esta área.

Teniendo en cuenta que esta área de la física se dedica tanto a la investigación experimental como teórica de la estructura electrónica y atómica de los sólidos, las transiciones de fase, las propiedades eléctricas y ópticas, sistemas en nanoescala, y fuertemente correlacionados como la superconductividad, magnetismo y ferroelectricidad, es que se intentará abordar la mayor cantidad de temas invitando a especialistas.

Haciendo un poco de historia, las primeras reuniones se realizaron a principios de los años 80: Sólidos 82 (Bariloche) y Sólidos 84 (Santa Fe). Con una idea similar y retomando el espíritu de las reuniones de los años 80 se reiniciaron las reuniones en el año 2005 en San Carlos de Bariloche con I Reunión Nacional de Sólidos, luego siguió II Reunión Nacional de Sólidos (2007) en Huerta Grande, Córdoba. En esta última se decidió incentivar la participación de investigadores chilenos a esta iniciativa, así la III Reunión Nacional de Sólidos (2009) se organizó exitosamente en Valparaíso. Luego se siguió con la IV Reunión Nacional de Sólidos en Tucumán (2011), la V Reunión Nacional de Sólidos en Rosario (2013), la VI Reunión Nacional de Sólidos en La Plata (2015) y ahí se decidió como sede para la próxima reunión a Bahía Blanca. En todas las reuniones las conferencias plenarias estuvieron a cargo tanto de invitados nacionales como internacionales.

La reunión está propuesta para tres días comenzando a las 9:00 hs. Se realizarán 12 conferencias plenarias, 15 conferencias semiplenarias, una mesa redonda y un importante espacio con amplio tiempo de discusión por grupos para las comunicaciones murales de los participantes durante el tiempo que dure la reunión. Se prevé un video

conferencia en conjunto entre el Dr. Neil W. Ashcroft (autor del famoso libro Solid State Physics y el premio Nobel de Química Dr. Roald Hoffmann desde Cornell University en Ithaca (USA) que serán de invaluable interés para los participantes en especial para los estudiantes asistentes.

Vale destacar nuestro interés en fomentar la participación de doctorandos y jóvenes estudiantes para los cuales se pedirá un especial apoyo a la Institución organizadora (UNS). La reunión permitiría que los jóvenes puedan interactuar con investigadores en actividad de diferentes lugares del mundo, principalmente con aquellos que tengan colaboraciones con grupos de nuestro país.

Agradecemos a las instituciones que colaboraron económica o logísticamente para la concreción de la Reunión, en especial a la Universidad Nacional del Sur que nos ha brindado además de un subsidio, sus instalaciones como sede del evento. Se suman a estos agradecimientos al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, al Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva, la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica y al Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica y el Banco Patagonia.

En nombre del Comité Organizador damos a todos los participantes del evento una muy cordial bienvenida y que disfruten de la Reunión y de la estadía en nuestra ciudad.

Gabriela F. Cabeza
Septiembre, 2017

COMITÉ CIENTÍFICO

Dr. Carlos Balseiro
Centro Atómico Bariloche
Río Negro, Argentina

Dr. Armando Fernández Guillermet
Centro Atómico Bariloche
Río Negro, Argentina

Dra. Ana Maria Llois
Instituto de Nanociencia y Nanotecnología
Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA)
Buenos Aires, Argentina

Dr. Francisco Sánchez
Departamento de Física, FCE, Universidad Nacional de La Plata.
Instituto de Física de La Plata
Buenos Aires, Argentina

Dr. Alberto Somoza
Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT)
Buenos Aires, Argentina

Dr. Francisco Tamarit
Facultad de Matemática, Astronomía y Física de la Universidad Nacional de Córdoba
Córdoba, Argentina

COMITÉ ORGANIZADOR

Departamento de Física,
Universidad Nacional del Sur-IFISUR

Dra. Gabriela F. Cabeza
Dr. Norberto J. Castellani
Dr. Leopoldo Gómez
Dra. Estela González
Dra. Paula Jasen
Dr. Alfredo Juan
Dr. Fernando Prado
Dra. Estela Pronsato
Dr. Daniel A. Vega

COLABORADORES

Departamento de Física,
Universidad Nacional del Sur-IFISUR

Dra. Silvia Fuente
Lic. María Julia Jiménez
Dra. Romina Luna
Dra. Lorena Meier
Dra. Cecilia Morgade
Dra. Sol Otero
Dr. Bruno Pascucci
Dr. Aldo Pezzutti

Auspiciantes

Agradecimientos

El Comité Organizador desea agradecer la colaboración del **Ing. Andrés Bonzani** por la confección de la página web del evento, al **Dr. Aldo Pezzutti** por el diseño del logo y a la **Dra. Silvia Fuente** por la compaginación de este libro.

Cronograma General

Horario	Lugar de la actividad	Sala	Designación
Por la mañana	Rectorado de la UNS – Avda. Colón 80	AM	Aula Magna
Por la tarde	Centro Histórico Cultural – Rondeau 29	CH 1 CH 2 CH 3 HC	Sala 1 Sala 2 Sala 3 Hall central

Horario	Miércoles 22		Jueves 23		Viernes 24
8:00-9:00	Inscripción		Inscripción		Inscripción
9:00-10:00	Foa Torres		Sapag		Rudolph
10:00-11:00	(VC) Aschcroft-Hoffmann		Gebauer		Ari Turner
11:00-11:30	Café (AM)		Café (AM)		Café (AM)
11:30-12:00	Lamas		Serquis		Baranova
12:00-12:30	Petrilli		Faccio		Abbate
12:30-14:30	Almuerzo (libre)		Almuerzo (libre)		Almuerzo (libre)
14:30-15:00	Passeggi	Zandalazini	Butera	Lobos	Weht
15:00-15:30	Perez	Ferrari	Torres	Mezio	Lustemberg
15:30-16:00	Frechero	Ramos	Correa	Guimpel	Ale Crivillero
16:00-16:30	Café (HC)		Café (HC)		Café (HC)
16:30-17:00	MR Transferencia Tecnológica (CH)		P (HC)		P (HC)
17:00-17:30					
17:30-18:00					
18:00-18:30					
19:00	**Cóctel Bienvenida**				Cierre
21:00			**Cena de camaradería EIS – Gorriti 51**		

VC: Videoconferencia

CP: Conferencias Plenarias.

SP: Conferencias Semiplenarias

P: Posters

MR: Mesa redonda

La coordinación de la **mesa redonda** estará a cargo de **Pablo Marinángeli**.

Título mesa redonda: "**Mitos y realidades de la transferencia tecnológica en Argentina".**

Ezequiel Manavela Chiapero
Ph.D. Technology Business Developer
CITES – Centro de Innovación Tecnológica Empresarial y Social S.A.
Dirección General Sancor Seguros
Grupo Sancor Seguros

Ing. César Curto,
Coordinador de Evaluación y Seguimiento Técnico de FONTAR
Fondo Tecnológico Argentino
ANPCYT - Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica
MINCYT - Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva

Dra. María Luz Martiarena
Instituto de Nanociencia y Nanotecnología
Centro Atómico Bariloche
Comisión Nacional de Energía Atómica

Dr. Pablo Marinángeli
Subsecretario de Vinculación Tecnológica
Universidad Nacional del Sur

Hora	Miércoles 22 de Noviembre	
09:00-10:00	CP1: Luis Foa Torres. *"From laser induced bandgaps and Floquet topological insulators to Floquet isolators: Non-perturbative effects of light-matterinteraction*"	
10:00-11:00	Video conferencia: Dr. R. Hoffmann – Dr. N. Ashcroft. *"High pressure as a meeting ground of chemistry and physics"*	
11:30-12:00	CP2: Diego Lamas. *"Diagramas de fases de nanomateriales: efectos y ejemplos en nanocerámicos"*	
12:00-12:30	CP3: Helena Petrilli. *"Ab-initio investigations of the magnetism at metallic interfaces and nanostructures deposited on surfaces"*	
14:30-15:00	SP1: Mario Passeggi. *"Caracterización multi-técnica de la generación de nanopartículas de hierro por bombardeo iónico*	SP4: Carlos Zandalazini. *"Defectos puntuales y magnetismo d^0 en calcogenuros"*
15:00-15:30	SP2: Silvia Pérez. *"ZnO, nuevas propiedades magnéticas, electrónicas y ópticas*	SP5: Valeria Ferrari. *"Ferromagnetismo en una estructura bidimensional de Nitruro de Galio Manganeso"*
15:30-16:00	SP3: Marisa Frechero. *"Nuevos materiales para la obtención de energías verdes"*	SP6: Susana Ramos. *"Caracterización de compuestos intermetálicos binarios de (Cu,Ni)-(In,Sn,Sb) y de orden superior para aleaciones de soldaduras libres de plomo: base de datos ab initio, sistemática y correlaciones en las propiedades cohesivas, termodinámicas y electrónicas"*

Hora	Jueves 23 de Noviembre	
09:00-10:00	CP4: Karim Sapag. *"Sólidos nanoporosos: síntesis, caracterización y aplicaciones energéticas y medioambientales mediante el uso de la adsorción"*	
10:00-11:00	CP5: Ralph Gebauer. *"Water splitting on hematite (Fe_2O_3) surfaces: insights from density functional theory"*	
11:30-12:00	CP6: Adriana Serquis. *"Técnicas avanzadas de caracterización de materiales para aplicaciones en energía"*	
12:00-12:30	CP7: Ricardo Faccio Sgiorovello. *"Estudio teórico y experimental de nanoestructuras de titanato de hidrógeno para aplicaciones en energía"*	
14:30-15:00	SP7: Alejandro Butera. *"Efecto Hall de espín inverso en heteroestructuras antiferromagnéticas sintéticas [Co/Ru/Co]/Pt"*	SP10: Alejandro Lobos. *"Fases topológicas fuertemente interactuantes en 1D: de los aislantes topológicos de banda a los aislantes topológicos de Kondo"*
15:00-15:30	SP8: Claudia Rodríguez Torres. *"Estructura magnética de equilibrio en $ZnFe_2O_4$: un sistema con frustración geométrica 3d º un antiferromagneto con orden de largo alcance"*	SP11: Alejandro Mezio. *Baja temperatura de coherencia en el modelo de Hubbard de una banda: un abordaje con partículas esclavas*

15:30-16:00	SP9: Víctor Correa. *"La influencia de la red atómica sobre las propiedades magnéticas: el caso de las aleaciones $CeCo_{1-x}Fe_xSi$"*	SP12: Julio Guimpel. *"Efecto del desorden en la red de centros de anclaje sobre la red de vórtices superconductores"*

Hora	Viernes 24 de Noviembre
09:00-10:00	CP8: Henrik Rudolph. Editor in chief of Applied Surface Science Disertará sobre *"How to successfully contribute to the world of scientific publishing a presentation meant for the aspiring author or reviewer"*
10:00-11:00	CP9: Ari Turner. *"The Fluctuating World of Low Temperatures: Entanglement in Condensed Matter Physics"*
11:30-12:00	CP10: Elena Baranova. *"Oxygen conducting ceramics as attractive supports for heterogeneous catalysis"*
12:00-12:30	CP11: Miguel Abbate: *"Spin state transition in the $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ compounds"*
14:30-15:00	SP13: Rubén Weht. *"Gas de electrones bidimensional en superficies de óxidos: nuevos resultados"*
15:00-15:30	SP14: Pablo Lusterberg. *"Cuán inocente es el óxido de cerio en la actividad catalítica de catalizadores metal-ceria: Una perspectiva teórica"*
15:30-16:00	SP15: Victoria Ale Crivillero. *"Efectos del espesor en películas delgadas de FeSe"*

CP1

From Floquet topological insulators to Floquet isolators

Luis E. F. Foa Torres

Departamento de Física, FCFM, Universidad de Chile, Santiago, Chile.
luisfoa@gmail.com

Light-matter interaction is at the heart of intriguing phenomena and has led to many practical applications like, for instance, Raman spectroscopy. But beyond characterization, several studies have gone deeper into actually using light to modify the electrical properties of a material. This can be done, for example, by using light to switch off the conduction in graphene [1,2] (or other materials [3]), thereby allowing to tune the material's response with optical means, or even inducing tunable topological states in materials that would otherwise lack them [1,2,4,5,6,7,8] (i.e. a *Floquet topological insulator* [4]). The latter would expand the playground of topological insulators to a broader set of materials. The recent experimental realization of laser-induced bandgaps at the surface of a topological insulator [3] has added much interest to this area.

In this talk I will provide an overview of our recent works in this field with a focus on the generation of Floquet chiral edge states in graphene [6,9,10] and other materials including topological insulators [8,11], and their Hall response [12]. I will also show how light-matter interaction could be used to realize a *Floquet isolator* [13], a system where transmission can occur only between say lead L and R and not viceversa while keeping a vanishing reflection at lead R*.

[1] T. Oka and H. Aoki, Phys. Rev. B **79**, 081406 (2009).
[2] H. L. Calvo, H. M. Pastawski, S. Roche, and L. E. F. Foa Torres, Appl. Phys. Lett. **98**, 232103 (2011); H. L. Calvo, P. M. Perez-Piskunow, S. Roche, and L. E. F. Foa Torres, Appl. Phys. Lett. **101**, 253506 (2012).
[3] Y. H. Wang, H. Steinberg, P. Jarillo-Herrero, and N. Gedik, Science **342**, 453 (2013).
[4] N. H. Lindner, G. Refael, and V. Galitski, Nat. Phys. **7**, 490 (2011).
[5] T. Kitagawa, T. Oka, A. Brataas, L. Fu, and E. Demler, Phys. Rev. B **84**, 235108 (2011).
[6] P. M. Perez-Piskunow, G. Usaj, C. A. Balseiro, and L. E. F. Foa Torres, Phys. Rev. B **89**, 121401(R) (2014).
[7] E. Suárez Morell and L. E. F. Foa Torres Phys. Rev. B **86**, 125449 (2012).
[8] H. L. Calvo, L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro and G. Usaj, Phys. Rev. B **91**, 241404(R) (2015).
[9] G. Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres, and C. A. Balseiro Phys. Rev. B **90**, 115423 (2014); P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres and G. Usaj, Phys. Rev. A **91**, 043625 (2015).
[10] D. A. Lovey, G. Usaj, L. E. F. Foa Torres, C. A. Balseiro, Phys. Rev. B **93**, 245434 (2016).
[11] V. Dal Lago, M. Atala and L. E. F. Foa Torres, Phys. Rev. A **92**, 023624 (2015).
[12] L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro, and G. Usaj, Phys. Rev. Lett. **113**, 266801 (2014).
[13] V. Dal Lago, E. Suárez Morell and L. E. F. Foa Torres, arxiv: 1708.03304. * related publications available at http://www.foatorres.com/

VC

High pressure as a meeting ground of chemistry and physics

Roald Hoffmann

Department of Chemistry & Chemical Biology, Cornell University, Ithaca, NY, USA.
rh34@cornell.edu

Diamond anvil cells now permit the study of matter under multimegabar (i.e. several hundred GPa) pressures. The properties of matter in this pressure regime differ drastically from those known at 1 atm. I will discuss in detail an overlapping hierarchy of responses to increased density, consisting of (a) squeezing out van der Waals space (for molecular crystals); (b) increasing coordination; (c) decreasing the bond length of covalent bonds and the size of anions; and (d) an extreme regime of electrons moving off atoms and new modes of correlation. Examples of the startling chemistry and physics that emerge under such extreme conditions will alternate in this account with qualitative chemical ideas about the bonding involved.

CP2

Diagramas de fases de nanomateriales: efectos y ejemplos en nanocerámicos

Diego G. Lamas

CONICET-Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM, Campus Miguelete, 25 de Mayo y Francia, (1650) San Martín, Provincia de Buenos Aires, Argentina.
Departamento de Física de la Materia Condensada, Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica, San Martín, Pcia. de Bs. As., Argentina
diego.g.lamas@gmail.com

Es sabido que los nanomateriales tienen enorme interés por sus propiedades sorprendentes y nuevas aplicaciones. Un aspecto menos conocido y también muy interesante es que se han encontrado cambios importantes en los diagramas de fases al reducir el tamaño de cristalita, incluyendo la retención de fases metaestables. Esto se debe a que la energía libre de Gibbs de superficie y la energía debida a las interfases provocan modificaciones importantes en las propiedades termodinámicas. Por este motivo, los diagramas de fases de sistemas nanoestructurados pueden ser muy diferentes a los diagramas de fases habituales, construidos considerando solamente la energía libre de volumen. Por ejemplo, la temperatura de fusión, los límites de solubilidad y la estabilidad relativa de fases se pueden modificar fuertemente. Sin embargo, esta nueva variable a contemplar en los diagramas de fases, el tamaño de cristalita, aún ha sido poco considerada en la literatura y muy poco explotada en aplicaciones.

En esta conferencia, se discutirán estos efectos y se analizarán varios ejemplos de nanomateriales con interés tecnológico, en especial el caso de óxidos nanocristalinos empleados en celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia: ZrO_2-Sc_2O_3 (material para electrolito) y de $La_{0,6}Sr_{0,4}CoO_{3-\delta}$ (cátodo). En ambos casos se mostrará que, al reducir el tamaño de cristalita, es posible retener a temperatura ambiente fases de alta temperatura que presentan excelentes propiedades eléctricas y electrocatalíticas.

CP3

Ab-initio investigations of the magnetism at metallic interfaces and nanostructures deposited on surfaces

Helena Maria Petrilli *

Depto. de Fisica dos Materiais, Instituto de Fisica, Universidade de São Paulo(IF-USP), Rua do Matão 1371 CEP 05508-090, Cidade Universitária, São Paulo – Brazil.
hmpetril@gmail.com

In this presentation, some recent examples of theoretical investigations, in the framework of the Density Functional Theory (DFT), performed in our group in Brazil will be discussed. Special attention will be given to electronic and magnetic properties of nanostructures deposited on surfaces and the magnetism at interfaces.

The search of new spintronic technologies, have open the door to the investigation of novel systems exhibiting exotic magnetic behaviors in the nanoscale, especially at interfaces and nanostructures. For example, magnetic skyrmions, which are topological spin textures, has given rise to a research field, now named "Skyrmionics" [1] with possible applications in devices, even with recent stable room-temperature observation [2].

Since skyrmions occur as spontaneous ground states in an Fe monolayer deposited on Ir(111) [3], and Pd is easily polarized by an adjacent magnetic layer, the bilayered PdFe/Ir(111) system arises as a promising candidate in which the Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interactions [4] at the surface and interfaces generate topologically protected magnetic states [5]. Motivated by these results, we have performed investigations of PdFe/Ir(111) and PdCo/Ir(111), using the RS-LMTO-ASA method [6], in the framework of the DFT and including non-collinear calculations, that will be shown.

Some other examples, of our current research using computational simulations, with biological molecules on interfaces will also be shown.

[1] S. Krause and R. Wiesendanger, Nat. Mater. 15 (2016) 493.
[2] S. Woo et al., Nat. Mater. 15 (2016) 501.
[3] S. Heinze et al., Nat. Phys. 7 (2011) 713.
[4] I. E. Dzyaloshinskii, J. Phys. Chem. Solids 4 (1958) 241; T. Moriya, Phys. Rev. 120 (1960) 91.
[5] C. Hanneken et al., Nat. Nanotechnol. 10 (2015) 1039.
[6] P. Peduto et al., Phys. Rev. B 44 (1991) 13283; S. Frota-Pessôa, Phys. Rev.B 46, 14570 (1992).

*En colaboración con Ivan de Paula Miranda, Angela Burlamaqui Klautau.

CP4

Sólidos Nanoporosos: Síntesis, Caracterización y Aplicaciones Energéticas y Medioambientales mediante el uso de la Adsorción

Karim Sapag

Laboratorio de Solidos Porosos, Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis, CONICET, San Luis, Argentina.
ksapag@gmail.com

Dentro de los gases de interés energético y medioambiental, se encuentran el hidrógeno, el metano y el CO_2. El hidrógeno, a pesar de tener importantes propiedades como combustible su aplicación líder dentro del campo de la investigación científica es como vector energético, para producir electricidad en pilas de combustible. Una vez obtenido este gas, el inconveniente principal es su almacenamiento, que tendría que ser "on board", y donde se han propuesto posibles sistemas, donde el proceso de adsorción aparece como una alternativa. El metano y el dióxido de carbono son dos conocidos gases de efecto invernadero, con importantes consecuencias medioambientales, donde la captura o secuestro de los mismo también se puede realizar mediante procesos de adsorción. Adicionalmente el metano, es una importante fuente de energía, donde en los sistemas vehiculares se utiliza comercialmente como Gas Natural Comprimido, en cilindros a altas presiones. Una mejora de su almacenamiento puede obtenerse mediante el uso de adsorbentes, bajando notablemente su presión para obtener la misma cantidad energética por volumen que el GNC.

Entre los adsorbentes sólidos para aplicaciones en gas, los materiales nanoporosos (sólidos con poros de hasta 100 nm) ocupan un papel importante, donde el desarrollo de los mismos conlleva un estudio minucioso de sus características texturales, donde la adsorción aparece nuevamente como técnica de caracterización.

En esta conferencia, se muestra el desarrollo de algunos materiales nanoporosos, su caracterización y su comportamiento en la adsorción de los gases enunciados, en base a la experiencia y trabajos desarrollados en el Laboratorio de Solidos Porosos de la Universidad Nacional de San Luis [1-10].

[1] A.A. García, J.C. A. de Oliveira, R. López, J.C. Moreno,L. Giraldo, G. Zgrablich, K. Sapag. Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 357 (2010) 74–83.
[2] A.A. García Blanco, A.F. Vallone, A. Gil, K. Sapag. Int J. of Hydrogen Energy, Vol. 37, No. 19, (2012) pp. 14870-14880.
[3] S. I. Garcés, J. Villarroel-Rocha, K. Sapag, S. A. Korili, and A. Gil. Ind. Eng. Chem. Res. (2013), 52, 6785−6793.
[4] P. Carraro, V. Elías, A.A. García Blanco, K. Sapag, G. Eimer, M. Oliva. Int J.l of Hyd En V:39 16, (2014) p 8749-87-53.
[5] P. Carraro, V. Elías, A. García, K. Sapag, S. Moreno, M. Oliva, G. Eimer. Micr and Mesop Mat, 191 (2014) 103–111.
[6] D. Bezerra, F.Silva, P. Moura, K. Sapag, R.Vieira, E. R Castellon, D. Azevedo. Ads Sci & Tech, 32, 2&3 (2014) 141-151.
[7] -P Carraro, A G Blanco, FA Soria, G Lener, K Sapag, GA Eimer, MI Oliva. Mic and Mês. Materials 231, 31-39, (2016)
[8] A. A. García Blanco, A. F. Vallone, S. A. Korili, A. Gil, K. Sapag. Microp. and Mesop. Mat. Vol. 224, (2016), P 323–331.
[9] SI Garcés-Polo, J Villarroel-Rocha, K Sapag, SA Korili, A Gil. Chemical Engineering Journal 302 (2016), 278-286.
[10] P. Carraro, AAG Blanco, C Chanquía, K Sapag, MI Oliva, GA Eimer. Mic and Mesop Materials 248, 62-71, (2017).

CP5

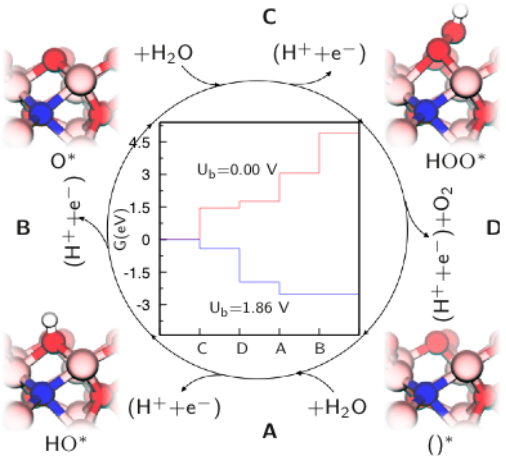
Water splitting on hematite (Fe_2O_3) surfaces: insights from density functional theory

Ralph Gebauer

The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Strada Costiera 11, 34151 Trieste, Italy.
rgebauer@ictp.it

The development of efficient ways to exploit the energy from the sun is an issue of major importance. Among possible solutions, the employment of solar energy to promote chemical reactions has the advantage of addressing the problems of harvesting, converting and storing energy at the same time. In this context, water splitting plays a central role both for direct hydrogen production and for the production of hydrocarbons. Therefore, great attention has been recently devoted to hydrogen production by means of photoelectrochemical (PEC) cells, via water splitting to molecular hydrogen and oxygen.

The main challenge is to develop anode materials for these cells that can split water efficiently. Hematite has emerged as a highly interesting material for photoanodes. Abundant, stable, nontoxic, and, importantly, possessing an energy gap of 2.1 eV, Fe_2O_3 has been intensively investigated in numerous experiments, often focusing on its photocatalytic properties. In this presentation, I will report recent numerical studies focusing on the oxidation of water on hematite (0001) surfaces. The reaction $2H_2O \longrightarrow O_2 + 2H_2$ involves four consecutive protons



coupled electron transfer steps. By means of density-function theory calculations, we investigate the role which the catalyst plays in those steps and how doping and defects of the iron oxide influence the photophysical activity of the anode.

CP6

Técnicas Avanzadas de Caracterización de Materiales para Aplicaciones en Energía

Adriana Serquis *

Departamento de Caracterización de Materiales, CAB-CNEA, Av. Bustillo 9500 CP8400 Bariloche.
CONICET, Argentina.
aserquis@cab.cnea.gov.ar

La fuerte relación entre la estructura cristalográfica y los defectos con las propiedades electrónicas y de transporte de un determinado sólido es una figura clave en la mayoría de las investigaciones realizadas en ciencia de los materiales. En particular, las propiedades de los óxidos (transporte, electroquímica, térmica, etc.) pueden verse afectadas por varios factores, incluyendo el método de síntesis y las condiciones ambientales tales como presión, temperatura, atmósfera, corriente eléctrica, campo magnético, etc. Por lo tanto, es importante ir más allá de la limitada información obtenida a través de las técnicas tradicionales de caracterización ex-situ hacia las más exhaustivas que proporcionan los experimentos in-situ o in-operando, donde es posible el estudio de un dispositivo bajo condiciones de trabajo no ambientales. En esta charla presentaré algunos de los últimos resultados obtenidos en nuestro grupo que involucran varios materiales cerámicos que están destinados a dispositivos de generación de energía limpia y sostenible como las pilas de combustible de óxido sólido (SOFC, por sus siglas en inglés) [1-3]. Se hará hincapié en la correlación entre los aspectos microestructurales (determinados por los parámetros de procesamiento) y sus propiedades físicas que determinan la eficiencia de los materiales. La estabilidad estructural y la compatibilidad química entre el electrodo y los materiales electrolíticos estudiados se evaluaron mediante la combinación de varias técnicas de caracterización, como microscopía electrónica (SEM, TEM), difracción de rayos X (DRX) o de neutrones (NPD), análisis químico por EDS y métodos de radiación de sincrotrón (como espectroscopías XANES y EXAFS). Es necesario comprender los procesos fisicoquímicos que ocurren tanto en el interior de los materiales, en las interfaces o en la superficie de componentes de los sistemas de interés, para encontrar la combinación ideal de materiales (y procesos de síntesis) que optimicen su rendimiento y estabilidad a largo plazo.

[1] L. Baqué et al; International Journal of Hydrogen Energy 41 (2016) 1958-1965.
[2] A. Fernández Zuvich et al.; ECS Trans. 72 (2016) 215-224.
[3] F. R. Napolitano et al; International Journal of Hydrogen Energy 37 (2013) 8965-8973.

* En colaboración con F. Napolitano, L. Baqué, M. Arce, L. Mogni, Juan F. Basbus, A. Soldati, A. F. Zuvich, M.E.Saleta, S. Larrondo y D. Lamas.

CP7

Estudio Teórico y Experimental de Nanoestructuras de Titanato de Hidrógeno para Aplicaciones en Energía

Ricardo Faccio

Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química. Universidad de la República.
rjfaccio@gmail.com

Las celdas solares de sensibilización espectral (DSSC) ejemplarizan como la nanotecnología ha aportado al desarrollo de energías renovables. Los semiconductores empleados deben tener buena superficie específica y adecuadas propiedades ópticas, esto posiciona al TiO_2 y titanatos de muy buena forma para la utilización de diferentes nanoestructuras de variadas relaciones de aspecto [1].

En este trabajo se mostrará un trabajo que integra teoría y experimento para la síntesis, y caracterización de nanotubos (NTs) de TiO_2 y titanatos a partir de nanopartículas de anatasa (~100 nm de diámetro). Además, se mostrará su caracterización estructural [2], así como el montaje y caracterización eléctrica de prototipos DSSC, utilizando el reactivo y el producto de síntesis como fotoelectrodos.

La caracterización estructural se llevó a cabo mediante Difracción de rayos X convencional y dispersión a bajo ángulo, además de microscopia TEM, de fuerza atómica y microscopia Raman Confocal. Toda esta información se combina con la información obtenida a partir de simulación computacional [2-4], dónde se conoció la estructura y morfología de los NTs y se determinaron las propiedades electrónicas más relevantes.

Los prototipos DSSC fueron evaluados mediante curvas I-V en determinando la eficiencia de conversión fotovoltaica, realizando además estudios de espectroscopía de impedancias para estudiar los fenómenos de transferencia de carga.

La eficiencia del prototipo basado en NTs fue mayor a la estándar de anatasa, con una eficiencia de 8% respecto al 6% que ofrece el último polimorfo.

[1] Faccio, R. et al. Rec. Pat. On Nanotec. 2011, 5, 325-333.
[2] Fernández-Werner, L. et al. J. Energy Storage 2017, 12, 66-77.
[3] Germán, E. et al. App. Surf. Sci. 2017, 426, 1182-1189.
[4] Germán, E. et al. J. Phys. Comm. 2017 (in press).

CP8

How to successfully contribute to the world of scientific publishing a presentation meant for the aspiring author or reviewer

Henrik Rudolph

Editor-in-Chief: Applied Surface Science
Rijnsweerd, De Uithof (Utrecht), Utrecht Province, Netherlands.
h.rudolph@apsusc.com

You may have, at some point, heard the expression "Publish or Perish". It is true that a scientist, who does not publish his or her scientific results in a reputable (electronic) journal, will not receive the necessary recognition or scientific respect as a scientist. It is often a major hurdle for a young scientist to get the first paper accepted in a scientific journal. This submission will, most likely, be related to a PhD thesis and the aspiring author will benefit from the support from their advisor and other senior scientists.

In this presentation I will give you some tips and suggestions, that will improve your chances of having your submission accepted in a reputable journal. I will also try to convince you to participate fully in the whole process of scientific publishing, including reviewing papers for scientific journal or helping others with their papers. The tips and tricks are not discipline specific; however, I will also give you a behind-the-scenes look at one of the larger scientific journals from the publisher Elsevier: *Applied Surface Science* with more than 13000 submissions per year and an impact factor of 3.387.

CP9

The Fluctuating World of Low Temperatures: Entanglement in Condensed Matter Physics

Ari Turner

Physics Department Thechnion- Israel Institute of Technology.
turner.ari@physics.technion.ac.il

In solid state physics, one uses quantum mechanics to understand properties such as the colors of crystals or their electrical conductivity, and it seems disappointing that the quantum mechanics is mainly a very complex framework for calculating lots of numbers. The interesting paradoxes of quantum mechanics, the uncertainty principle and the possibility of particles being entangled with one another, seem to lurk
somewhere in these details.

I will talk about phenomena where the quantum phenomena are especially easy to see, in particular, how entanglement lies behind topological phases. I will also talk about how the virtual particles in Feynman diagrams are not just a representation of calculations, but that they actually exist in the ground state and they are related to phenomena such as magnetic interactions that lead to spin glasses. They can be described by an entanglement Hamiltonian, which is like a dynamic for the virtual fluctuations, and which can theoretically be measured in atomic lattices.

CP10

Oxygen conducting ceramics as attractive supports for heterogeneous catalysis

Elena A. Baranova*

Department of Chemical and Biological Engineering, Centre for Catalysis Research and Innovation (CCRI), University of Ottawa, 161 Louis-Pasteur, Ottawa, ON, K1N 6N5, Canada.
elena.baranova@uOttawa.ca

Solid ionic conductors such as yttria-stabilized zirconia (YSZ) and doped-ceria (Sm-CeO_2 or Gd-CeO_2) are widely used in the fuel cells, sensors and in heterogeneous catalysis, particularly in electrochemical promotion of catalysis (EPOC) [1,2]. For instance, yttria-stabilized zirconia (8%-Y_2O_3-ZrO_2) has attracted significant attention in the last decades due to its unique properties such as high ionic conductivity in the temperature range of 300 - 1000ºC due to the presence of oxygen vacancies, as well as chemical and mechanical stability. Ceria (CeO_2), a mixed ionic-electronic conducting (MIEC) material, conducts O^{2-} ions due to oxygen vacancies in the crystallographic structure and electrons. Additionally, because of its non-stoichiometry, CeO_2 has the ability to undergo conversion between Ce^{4+} and Ce^{3+} quite easily. In heterogeneous catalysis, this reducibility and presence of oxygen vacancies play a significant role in the enhancement of catalytic activity, usually referred to as metal-support interaction (MSI). Similarly, the phenomenon known as electrochemical promotion of catalysis (EPOC) or non-faradaic electrochemical modification of catalytic activity (NEMCA) has also been shown to alter catalytic activity by in-situ controlled migration of promoting species such as O^{2-} through the application of an electrical current or potential [3]. EPOC and MSI have long been considered as two different phenomena, however, more recently it has been shown that, functionally, for ionic and MIEC materials, both are linked by the transfer of ionic species at the interfaces. The difference between the two phenomena has been shown to be only operational [3, 4]. It has been said that EPOC is electrochemically controlled MSI, likewise, MSI is considered as self-induced EPOC. First, the concept of MSI and EPOC phenomena and their origin will be presented, following by the discussion of EPOC and MSI at the RuO_2, IrO_2, Ni- and Pt-based nano-structured catalyst interfaced with YSZ and CeO_2 in the instance of complete ethylene and carbon monoxide oxidation as well as CO hydrogenation [5,6].

[1] J.H. Shim, C. Chao, H. Huang, F.B. Prinz, *Chemistry of Materials* 19 (2007) 3850.
[2] P. Vernoux, L. Lizarraga, M.N. Tsampas, F.M. Sapountzi, A. De Lucas-Consuegra, J.L. Valverde, S. Souentie, C.G. Vayenas, D. Tsiplakides, S. Balomenou, E.A. Baranova, *Chem. Rev.* 113 (2013) 8192-8260.
[3] C.G. Vayenas, Electrochemical Activation of Catalysis: Promotion, Electrochemical Promotion, and Metal-Support Interactions, Springer, 2001.
[4] H.A.E. Dole, E.A. Baranova Implementation of Nano-structured Catalysts in the Electrochemical Promotion of Catalysis, *Handbook of Nanoelectrochemistry: Electrochemical Synthesis Methods, Properties, and Characterization Techniques.* Aliofkhazraei, M., Makhlouf, A.S.H. (Eds.), Springer International Publishing, Switzerland 2015. p. 1095-1124.
[5] Y.M. Hajar, K. D. Patel, U. Tariq, E.A. Baranova, *J. Cat.* 352, 2017, 42-51
[6] R.J. Isaifan, M. Couillard, E.A. Baranova, *Int. J. Hydrogen. Energy* (2017) Doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.01.049.

* En colaboración con Yasmine M. Hajar y Holly A.E. Dole.

CP11

Spin state transition in the $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ compounds

Miguel Abbate

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná.
miguel@fisica.ufpr.br

We studied the electronic structure of the $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ compounds from x = 0.0 to x = 1.0. The techniques were photoemission (PES) and x-ray absorption (XAS) spectroscopy. The experiments were carried out at the Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). The spectra were compared to band structure and cluster model calculations. The cluster model was solved using the configuration interaction (CI) method. The purpose was to determine the spin state of the Co ions as a function of x. To this end, the experimental results were compared to calculations in different spin states. The present work was intended to determine the spin moments at room temperature. The elucidation of the spin state as a function of temperature will be presented elsewhere. The $LaCoO_3$ material, with x = 0.0, shows mostly Co^{3+} ions in a non-magnetic low-spin S = 0 state (the high-spin S = 2 component emerges only at higher temperatures). The $LaCoO_3$ oxide is in the so called negative charge transfer regime; this means that the ground state is dominated by the covalent $3d^7\underline{L}$ configuration (where $\underline{L}$ denotes a ligand hole). On the other hand, the $SrCoO_3$ end member, with x = 1.0, exhibits Co^{4+} ions in a ferromagnetic intermediate-spin S = 3/2 state. The $SrCoO_3$ compound is also in the negative charge transfer regime; the main configuration in the ground state is given by the covalent $3d^8\underline{L}$ configuration. Finally, the results along the $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ series suggest an inhomogeneous scenario, with ferromagnetic domains (formed in the Sr-rich parts) embedded in a non-magnetic host (given by the La-rich regions).

SP1

Caracterización multi-técnica de la generación de nanopartículas de hierro por bombardeo iónico

Mario C.G. Passeggi (h)*

Instituto de Física del Litoral (Universidad Nacional del Litoral-CONICET), Güemes 3450, (S3000GLM) Santa Fe, Argentina
Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, (S3000AOM) Santa Fe, Argentina.
mpggih@santafe-conicet.gov.ar

La pirita (FeS_2) es un mineral natural abundante, con estructura cristalina cúbica, diamagnético y semiconductor en su forma nativa. Al ser un material de bajo costo, es la materia prima en la producción industrial de hierro y ácido sulfúrico. Actualmente, está siendo objeto de importantes estudios en ciencia básica debido a sus potenciales aplicaciones en un amplio espectro de temas que van desde la bioquímica primordial [1] al desarrollo de semiconductores en la escala nanométrica [2].

Recientemente, nuestro grupo ha reportado resultados relativos a cambios químicos inducidos en un monocristal natural de FeS_2 por bombardeo iónico de He^+ a 4.5 keV mediante espectroscopia de fotoemisión de rayos X (XPS) [3]. Este estudio, muestra un importante efecto de reducción del Fe^{2+}, con la formación de *Fe* metálico embebido en la matriz de FeS_2. A partir de estos resultados, se realizó un análisis multi-técnica de muestras de pirita bombardeadas con iones energéticos de He^+ a diferentes energías. Con el objeto de caracterizar la morfología y distribución en profundidad del *Fe* metálico generado en la pirita, estudiamos el sistema mediante microscopía túnel de barrido (STM), espectroscopia de electrones Auger (AES) combinada con perfiles en profundidad, en ambos casos en condiciones de ultra alto vacío (UHV), y microscopías de fuerza atómica (AFM) y magnética (MFM) al aire. Aun cuando nuestro interés es la obtención de conocimiento relativo a la física y química básica del proceso antes descripto, nuestro estudio apunta a la generación de dominios nanometálicos en una matriz semiconductora, que por sí solo tiene un importante interés desde el punto de vista tecnológico.

A partir de la irradiación iónica, mediante imágenes STM se observó una superficie nanoestructurada granular que depende básicamente de la preparación de la superficie. Mientras superficies limpias sin una reconstrucción exhaustiva muestran nanopartículas (*Np´s*) de *Fe* cuyos diámetros aparentes promedio varían entre 7-4 nm para energías entre 1-4 keV, respectivamente, superficies reconstruidas exhaustivamente a partir de un proceso de recocido de al menos 2 horas muestran *Np´s* con diámetros aparentes promedio de 2-3 nm, independientemente de la energía utilizada. En el primer caso, cuanto más pequeñas las *Np´s* formadas mayor es su densidad superficial, y parece haber una energía iónica umbral para el proceso. En cambio, para las superficies bien reconstruidas, aunque la densidad superficial es independiente de la energía iónica, se observa un importante incremento en la rugosidad superficial promedio (RMS), directamente proporcional a la energía de bombardeo iónica.

Además, utilizando el *O* como marcador, estudiamos su penetración en la estructura para diferentes valores de energía cinética de He^+, a través de perfiles en profundidad con AES. Se encontró una muy buena correlación entre la penetración del *O* con el aumento de la energía de los iones, indicando que el proceso por el cual se forman las *Np´s* está energéticamente activado. Las imágenes AFM en aire, muestran la formación de *Np´s* granulares también, de tamaños mayores que las observadas por STM en UHV, para las cuales solo en el caso de superficies limpias sin una reconstrucción exhaustiva se observó contraste magnético a partir de experimentos de MFM, lo que indica que las *Np´s* de Fe^0 generadas en UHV se oxidan en aire a magnetita (Fe_3O_4) o maghemita (Fe_2O_3), o una combinación de ambos, los cuales a temperatura ambiente son magnéticos.

[1] M.J. Russell, A.J. Hall, A.P. Gize, Nature **344** (1990) 387.
[2] L. Ding, X. Fan, X. Sun, J. Dua, Z. Liva, C. Tao, RSC Adv. **3** (2013) 4534.
[3] G. Ruano, F. Pomiro, J. Ferrón, enviado a Surface Science.

* En colaboración con Fernando Pomiro, Adriana E. Candia, Silvia M. Montoro, Gustavo Ruano y Julio Ferrón.

SP2

ZnO, nuevas propiedades magnéticas, electrónicas y ópticas

Silvia Pérez de Heluani

Laboratorio de Física del Sólido, Dto. De Física, Fac. de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán. Av. Independencia 1800, 4000 San Miguel de Tucumán, Argentina.
sperez@herrera.unt.edu.ar

El ZnO es un semiconductor de gap de banda ancho intensivamente estudiado en las últimas décadas.

Nano y micro estructuras de ZnO son atractivas como sensores biológicos, emisores de luz, nano láseres UV, biomateriales, memorias magnéticas etc. En los últimos años la investigación básica en este material ha sido revisitada por la necesidad de describir nuevas resultados experimentales de propiedades físicas fuertemente controlada por la concentración de defectos, como el amplio rango de valores en la conductividad, la producción de cuasipartículas (exciton-polariton), efecto de puntos cuánticos y, particularmente ha abierto una animada discusión sobre el papel de los defectos en la transformación de compuestos de ZnO no magnéticos en materiales ferromagnetos.

A pesar de la numerosa producción científica existen controversias en la literatura sobre el papel de los defectos en las propiedades mencionadas, y el principal obstáculo para el funcionamiento a temperatura ambiente en aplicaciones tecnológicas sigue siendo la obtención de material tipo *p* con la concentración de defectos adecuada.

Esta charla es un resumen del estado del arte en las investigaciones de algunas de las propiedades importantes a temperatura ambiente del ZnO y de los resultados más reciente de nuestro grupo de investigación y colaboraciones.

SP3

Nuevos materiales para la obtención de energías verdes

Marisa A. Frechero

Departamento de Química/ Grupo: Fisicoquímica de Conductores Iónicos de Estado Sólido – INQUISUR- CONICET- Universidad Nacional del Sur. Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina.
frechero@uns.edu.ar

Uno de los grandes desafíos actuales tanto para la ciencia como para la tecnología es el desarrollo de formas de almacenamiento de energía obtenidas de fuentes alternativas, *i.e.* no dependiente de los hidrocarburos. Las denominadas "energías verdes o limpias" se espera que también den lugar a su expansión en grandes redes de distribución.

En esta presentación analizaremos dos iniciativas bien diferentes: por una parte, la *acumulación de energía mediante procesos electroquímicos y por otra, la cosecha de energía por fenómenos físicos.*

En la actualidad las grandes “estrellas" son las baterías de litio. Habitualmente, estas baterías pueden operar debajo del límite oxidativo de ciertos electrolitos, sin embargo, una pequeña sobrecarga, permite alcanzar procesos de consumo de material electródico y electrolítico con generación de gases que derivan en riesgo de explosión con alta probabilidad de daño a las personas. Por esta razón, el desarrollo de materiales seguros, con mayor vida útil, mayor rango de temperatura operativa, obtenidos de materiales con mayor disponibilidad y menor índice de toxicidad a menor costo son buscados especialmente en el campo de la ciencia de materiales.

La generación de energías limpias es un constante desafío al que se enfrenta el mundo actual. Desde una perspectiva muy diferente, el reciclaje de residuos domésticos e industriales, muestra también un enorme potencial para el desarrollo de nuevos materiales con vasta aplicación en el campo del ahorro energético. Presentaremos aquí un desarrollo innovador de un material compuesto a partir del reaprovechamiento de materiales de desecho cuya propiedad fundamental se centra en recibir luz solar y transformarla en calor.

SP4

Defectos puntuales y magnetismo d^0 en calcogenuros

Carlos I. Zandalazini *

Instituto de Física del Litoral (CONICET-UNL), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina
carlos.zandalazini@santafe-conicet.gov.ar

El orden magnético espontáneo en materiales ya no es considerado una propiedad ligada exclusivamente a los sistemas que contienen electrones en capas 3d y 4f parcialmente ocupadas. En los últimos años se han reportado numerosos trabajos, tanto teóricos como experimentales, que indican que la formación de momentos magnéticos locales, y su eventual interacción colectiva, se presenta también en sistemas con átomos con capas s y p parcialmente ocupadas. Sin embargo, el uso de metodologías convencionales para estudiar este tipo de sistemas ha mostrado serias dificultades, dando lugar a resultados controversiales, y consecuentemente, a la falta un consenso pleno sobre el origen del magnetismo en estos materiales. En particular, el uso de la Teoría de la funcional densidad (DFT) estándar (GGA/LSDA), subestima la repulsión coulombiana y tiende a sobre deslocalizar la densidad de carga, lo cual conlleva a una interacción magnética inexacta.

En esta charla se presentarán estudios predictivos sobre el comportamiento magnético, asociado a defectos puntuales, en ZnX (X=S, Se, Te), y SnS. Los cálculos se realizaron con DFT+U (U sobre estados p), considerando vacancias catiónicas en ZnX, y diferentes dopantes sustitucionales en SnS. Los resultados indican que, tanto para la formación del momento magnético como para la interacción colectiva entre éstos, considerar estas correcciones locales en la interacción de los estados p es crucial.

* En colaboración con Eduardo A. Albanesi.

SP5

Ferromagnetismo en una estructura bidimensional de Nitruro de Galio Manganeso

Valeria Ferrari *

Departamento de Física de la Materia Condensada, GIyA, CAC-CNEA, 1650 San Martín, Buenos Aires, Argentina e Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CONICET, Argentina.
ferrari@tandar.cnea.gov.ar

La aplicación práctica de dispositivos semiconductores magnéticos en espintrónica requiere de un comportamiento ferromagnético a temperatura ambiente o mayores. Esta charla reporta un trabajo teórico-experimental en el cual se ha logrado sintetizar una estructura de superficie que denominamos nitruro de galio manganeso (MnGaN), que presenta dominios ferromagnéticos a temperatura ambiente. La estructura se obtiene a partir del depósito de átomos de manganeso sobre la superficie de nitruro de galio GaN(000-1), mediante técnicas de epitaxia molecular MBE. La misma tiene un espesor atómico y se forma a partir de una reconstrucción que involucra átomos de manganeso y de la superficie. El comportamiento ferromagnético es observado a partir de microscopía de efecto túnel polarizada en espín SP-STM y puede explicarse mediante cálculos de primeros principios. Las simulaciones revelan la presencia de estados de superficie altamente polarizados, resultando en un acoplamiento ferromagnético de largo alcance entre los átomos de manganeso. Este acoplamiento se encuentra mediado tanto por los átomos de Ga de la superficie como por Ga adátomos y es fuertemente dependiente de la reconstrucción de la superficie. La estructura MnGaN encontrada es un material ferromagnético delgado que tiene el potencial de ser usado en dispositivos semiconductores basados en espín, que funcionen a temperatura ambiente.

* En colaboración con María Andrea Barral, Yingqiao Ma y Arthur R. Smith.

SP6

Caracterización de compuestos intermetálicos binarios de (Cu,Ni)-(In,Sn,Sb) y de orden superior para aleaciones de soldaduras libres de plomo: base de datos ab initio, sistemática y correlaciones en las propiedades cohesivas, termodinámicas y electrónicas

Susana B. Ramos *

Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas – CONICET – Univ. Nac. del Comahue, Depto. de Física, Facultad de Ingeniería, Neuquén, Argentina
sbramos@yahoo.com

Conocer las propiedades de compuestos intermetálicos vinculados a los sistemas (Cu,Ni)-(In,Sn,Sb) es de interés actual en relación al diseño y aplicación de nuevas aleaciones para soldaduras libres de plomo. En este trabajo se exponen los avances de una investigación de largo plazo que se viene desarrollando en torno a estos sistemas, con el fin de caracterizar y analizar la sistemática y tendencias en las propiedades fundamentales de esta familia de compuestos, a partir de la aplicación de métodos de cálculo ab initio. Más específicamente, son objetivos de esta investigación: (i) el desarrollo de una base de datos completa con información estructural, termodinámica, cohesiva y elástica de compuestos intermetálicos (CIs) binarios del tipo Me_aX_b (con Me=Cu,Ni and X=In,Sn,Sb); y, a partir de dicha información, (ii) la identificación de tendencias para estas propiedades y su correlación con el comportamiento electrónico. Se consideran para ello mayormente fases binarias reportadas como estables o metaestables, así como fases hipotéticas formuladas en base a subredes involucradas en modelados termodinámicos a través del formalismo de energía-compuesto, incluyendo también algunos CIs ternarios selectos vinculados a los sistemas (Cu,Ni)-In-(Sn,Sb). El estudio se basa en una extensa base de datos con información sobre energías totales en función del volumen obtenida utilizando la teoría de la funcional densidad (DFT) y el método de ondas planas aumentadas (PAW), extendido para incluir efectos térmicos en el marco de la aproximación cuasi-armónica. Introduciendo el concepto de número de grupo promedio (AGN), evaluado como el número promedio de los electrones de valencia involucrados en los cálculos, se muestra que el volumen (V_o), módulo de compresión (B_o) y energía cohesiva (E_{coh}) de estos CIs pueden ser estudiados como función del AGN. Más aún se muestra que existe una buena correlación con los parámetros AGN y B_o para la densidad de energía cohesiva (E_{coh}/V_o), y se predicen nuevas correlaciones para las relaciones $(B_o/V_o)^{½}$ and ($E_{coh}^{½}/V_o$) en función del parámetro AGN. Estas regularidades son interpretadas en base a la evolución de las contribuciones de los electrones *p* y *d* a las densidades de estado electrónicas con la composición, destacándose los efectos de la hibridización *p-d* sobre la cohesión, y el llenado de estados enlazantes y antienlazantes.

* En colaboración con D.S. Bertoldi, N.V. González Lemus, C. Deluque Toro, G.F. Cabeza y A. Fernández Guillermet.

SP7

Efecto Hall de espín inverso en heteroestructuras antiferromagnéticas sintéticas [Co/Ru/Co]/Pt

Alejandro Butera*

Centro Atómico Bariloche, Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA) y Conicet, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina.
butera@cab.cnea.gov.ar

La generación, detección y manipulación de corrientes de espín es uno de los grandes desafíos de la electrónica basada en el espín de los electrones o "espintrónica".

En sistemas magnéticos, la resonancia magnética involucra un mecanismo de absorción de energía en forma de momento angular por parte de los espines. En el caso de una bicapa ferromagneto/metal no magnético (FM/NM) con espesores nanométricos, en la cual se lleva al FM a su condición de resonancia, se observa que este es capaz transferir parcialmente el momento angular absorbido en forma de una corriente de espín hacia el NM, fenómeno conocido como "spin pumping". Este proceso depende de las propiedades de los materiales involucrados y es posible medirlo a partir del efecto Hall de espín inverso (ISHE), que convierte una corriente de espín en un voltaje.

Presentaremos un resumen de los estudios que estamos realizando en esta temática, que abarcan desde la fabricación de las nanoestructuras, la generación/detección de la corriente de espín, así como también diversas propuestas para manipularla. Mostraremos resultados obtenidos y propuestas para futuras investigaciones.

En particular, presentamos estudios de inyección de corriente de espín y medición de ISHE en heteroestructuras del tipo [Co/Ru/Co]/Pt con acople antiferromagnético [1]. El proceso tipo "spin-flop" de la reversión en la magnetización de las capas de Co combinado con la inyección de una corriente de espín, nos ha permitido detectar tanto la componente transversal como la longitudinal de la acumulación de carga debida al ISHE. El control de la magnitud de la interacción de intercambio entre las capas de Co determinada por el espesor del Ru, permite ajustar el proceso de reversión de la magnetización y producir corrientes de espín polarizadas en diferentes direcciones

[1] L. Avilés-Félix, A. Butera, and J. E. Gómez, Applied Physics Letters 110, 052402 (2017).

* En colaboración con Luis Avilés Félix, Javier Gómez y Livio Leiva.

SP8

Estructura magnética de equilibrio en $ZnFe_2O_4$: un sistema con frustración geométrica 3D o un antiferromagneto con orden de largo alcance

Claudia Rodríguez Torres

[IFLP] Instituto de Física de La Plata, [CCT-CONICET - La Plata] Centro Científico Tecnológico CONICET - Calle 49 Y 115 S/n - C.c. 67, La Plata, Pcía. Buenos Aires, Argentina.
torres@fisica.unlp.edu.ar

En la ferrita de zinc ($ZnFe_2O_4$) prístina el Zn^{2+} ocupa sitios tetrahedrales y el Fe^{3+} octahedrales. Puesto que los Zn^{2+} no son magnéticos, para estudiar el magnetismo del sistema se puede tener en cuenta sólo los sitios Fe^{3+}. Éstos, se encuentran ubicados en los vértices de un tetraedro y cada vértice es compartido por dos tetraedros. La red de tetraedros tiene la misma configuración atómica que varios pirocloros y compuestos intermetálicos del tipo fases de Lave C15. Estos sistemas presentan frustración geométrica tridimensional y dan lugar a estados bases inusuales cómo vidrios de spin, hielos de espín, líquidos de espín, etc.

En esta charla, se mostrarán resultados de un estudio basado en cálculos de primeros principios y simulaciones Monte Carlo sobre la configuración magnética de equilibrio de la ferrita de Zn. Mediante cálculos ab-initio se calcularon las constantes de intercambio y a partir de las mismas se realizaron simulaciones Monte Carlo para obtener las curvas de susceptibilidad magnética. Las curvas simuladas se comparan con resultados experimentales obtenidos para monocristales y para polvos policristalinos. Se evalúa también el rol de los defectos en los valores de las constantes de intercambio y el orden magnético.

SP9

La influencia de la red atómica sobre las propiedades magnéticas: el caso de las aleaciones $CeCo_{1-x}Fe_xSi$

Víctor F. Correa *

Centro Atómico Bariloche (CNEA) e Instituto Balseiro (U. N. Cuyo), 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina.
victor.correa@cab.cnea.gov.ar

Al estudiar el magnetismo de sistemas sólidos, es usual despreciar la influencia de la red atómica. Esto se debe a que los sólidos, en general, son suficientemente compactos y rígidos como para que eventuales mínimas deformaciones de la red atómica afecten las propiedades magnéticas. Hay excepciones como, por ejemplo, los óxidos de Mn conocidas como manganitas que tienen asociado a la célebre magnetorresistencia colosal un efecto magnetostrictivo gigante.

En este trabajo presentamos otro sistema donde las interacciones magnetoestructurales son sumamente relevantes. Las propiedades físicas de bajas temperaturas ($T < 20$ K) de las aleaciones $CeCo_{1-x}Fe_xSi$ están dominadas por las correlaciones electrónicas. En el límite estequiométrico ($\mathbf{x} = 0$), existe orden antiferromagnético ($T_N = 8.8$ K). Este orden se debilita conforme aumenta el contenido de Fe desapareciendo finalmente alrededor de $\mathbf{x_c} = 0.23$. Sin embargo, la magnetostricción (la deformación de la red [L(B)-L(0)]/L(0) ante un campo magnético externo B) crece continuamente con $\mathbf{x}$ alcanzando un valor extremo de $3\cdot10^{-3}$ (B = 16 T) en $\mathbf{x_c}$. Este valor es comparable a los valores más altos reportados en la literatura.

Por último, para concentraciones de Fe mayores, el efecto disminuye nuevamente.

* En colaboración con A. G. Villagrán Asiares, D. Betancourth, S. Encina, P. Pedrazzini, D. J. García, P. S. Cornaglia, J. G. Sereni, B. Maiorov, N. Caroca Canales y C. Geibel.

SP10

Fases topológicas fuertemente interactuantes en 1D: de los aislantes topológicos de banda a los aislantes topológicos de Kondo

Alejandro M. Lobos *

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo y CONICET, Mendoza.
lobos@ifir-conicet.gov.ar

El reciente descubrimiento de los materiales topológicos ha revolucionado la investigación en la física de la Materia Condensada. Estos materiales constituyen nuevas fases de la materia que no se clasifican de acuerdo a un parámetro de orden local, sino de acuerdo a la topología de la función de onda electrónica. Gran parte del interés en esta área está dado por los peculiares estados cuánticos que aparecen en los bordes, los cuales están protegidos topológicamente y podrían utilizarse en computación cuántica "topológica", espintrónica y nanoelectrónica.

Sin embargo, nuestro entendimiento de las fases topológicas de la materia está limitado en gran parte a los sistemas no interactuantes, donde las propiedades se explican mediante la llamada "teoría topológica de bandas". La incorporación de los efectos de las interacciones entre electrones abre nuevas preguntas y supone un enorme desafío teórico. En ese sentido, el estudio de los llamados Hamiltonianos modelo (por ej., modelo de Hubbard) nos permiten comprender y predecir cuál sería el efecto de las interacciones en los materiales topológicos.

En esta charla me concentraré en los llamados aislantes topológicos de Kondo, sistemas en los cuales la interrelación entre la topología no trivial de las bandas y las interacciones fuertes ocurre naturalmente. Contaré en particular resultados recientes utilizando modelos teóricos propuestos para describir un aislante topológico de Kondo en 1D: el modelo de Kondo-Heisenberg de onda p y el modelo de Hubbard tipo "ladder sp". Utilizando la técnica de bosonización Abeliana y el grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG) logramos caracterizar las propiedades topológicas de las fases cuánticas fuertemente interactuantes del sistema. El análisis de diversos observables del sistema (estados de borde, gaps de excitación de carga y espín, parámetros de orden, etc.) permite afirmar que el estado fundamental corresponde a la fase de Haldane, una fase típicamente asociada a la cadena de Heisenberg antiferromagnética de S=1, con orden topológico de tipo "string" y estados de borde magnéticos con espín S=1/2. Esto supone una interesante conexión entre sistemas topológicos interactuantes y no interactuantes que no había sido explorada hasta el momento.

* En colaboración con Franco T. Lisandrini, Ariel O. Dobry y Claudio J. Gazza.

SP11

Baja temperatura de coherencia en el modelo de Hubbard de una banda: un abordaje con partículas esclavas

Alejandro Mezio *

Escuela de Matemática y Física, Universidad de Queensland, Brisbane QLD 4072, Australia.
a.mezio@uq.edu.au

La fase metálica de un amplio abanico de materiales fuertemente correlacionados posee propiedades consistentes con un líquido de Fermi, pero sólo debajo de una escala de temperatura muy baja (órdenes de magnitud más pequeña que la temperatura de Fermi sin correlaciones). A esta temperatura de coherencia Tcoh ocurre un entrecruzamiento hacia un régimen sin cuasi-partículas y con transporte incoherente, conocido como el estado "bad metal".

En esta charla, hablaré sobre nuestro reciente trabajo donde utilizamos métodos de partículas esclavas (bosones esclavos de Kotliar-Ruckenstein [1] y espines esclavos [2]) para estudiar la dependencia con la temperatura de la fase paramagnética del modelo de Hubbard de una banda. Calculamos el peso espectral de cuasi-partícula Z e identificamos la temperatura a la cual ésta decrece significativamente como el entrecruzamiento hacia una región "bad metal". Cerca de la transición metal-aislador, obtenemos que Tcoh es mucho más pequeña que la temperatura de Fermi sin correlaciones y, luego de un escaleo apropiado, encontramos un comportamiento universal independiente de la estructura de bandas. Una comparación directa con la teoría de campo medio dinámico (DMFT en inglés) muestra en el caso de bosones esclavos un acuerdo cualitativo en la dependencia con la temperatura de la doble ocupación, entropía y compresibilidad de carga [3].

[1] G. Kotliar, A. E. Ruckenstein; Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 1362.
[2] L. de' Medici, M. Capone en The Iron Pnictide Superconductors: An Introduction and Overview, F. Mancini y R. Citro (Eds.), Springer Series in Solid-State Sciences (2017) Vol. 186: 115-185.
[3] A. Mezio, R. H. McKenzie; Phys. Rev. B 96 (2017) 035121.

* En colaboración con Ross H. Mc Kenzie.

SP12

Efecto del desorden en la red de centros de anclaje sobre la red de vórtices superconductores

Julio Guimpel *

División Bajas Temperaturas, Centro Atómico Bariloche, CNEA - CONICET - Instituto Balseiro, UNCuyo y CNEA, (8400) Bariloche, Argentina.
anasarmiento9@gmail.com

El diseño y construcción por litografía de redes de defectos ordenados en superconductores ha permitido el estudio de los efectos de la conmensuración entre esta red y la red de los vórtices superconductores. Se ha visto que tanto la configuración estática como la dinámica se ven afectadas. Sorprendentemente, un aspecto que ha sido muy poco estudiado es el del desorden en la red de defectos. Hemos fabricado films superconductores con redes de agujeros submicrométricos con desorden controlado, depositando por sputtering films de Nb sobre membranas porosas de alúmina. En estas membranas se controló el grado de desorden de las redes de poros durante el proceso de anodizado. Las mediciones de respuesta magnética muestran claramente efectos de matching entre las redes de agujeros y vórtices. Se relacionarán las características de este matching con el desorden de la red de agujeros.

* En colaboración con Sarmiento Chavez A. C., Montón C., Giuliani J. y Cadenas J.

SP13

Gas de electrones bidimensional en superficies de óxidos: nuevos resultados

Rubén Weht *

Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Avda. General Paz y Constituyentes, San Martín (1650), Argentina.
weht@tandar.cnea.gov.ar

El descubrimiento, hace relativamente pocos años, de un gas de electrones bidimensional en la interfaz de dos óxidos aislantes y no magnéticos, $LaAlO_3$ y $SrTiO_3$, es un remarcable ejemplo de cómo la reconstrucción de estados electrónicos en dimensiones reducidas puede dar lugar a nuevas propiedades, totalmente inesperadas. En dicho gas se han encontrado algunos fenómenos realmente notables, como transiciones de fases metal-aislante, superconductividad controlada por campos eléctricos, magnetismo bidimensional, etc., llegándose a la formulación de posibles dispositivos electrónicos, lo que le ha dado un renovado impulso al estudio de interfaces de óxidos en general. En una colaboración teórico-experimental reciente hemos demostrando la existencia de un gas de electrones similar simplemente en la superficie de uno de dichos óxidos, $SrTiO_3$(001). Este gas resultó ser *universal*, en el sentido que no depende del dopaje en volumen del compuesto, y fue posteriormente encontrado en otros materiales y superficies. Existe hoy el convencimiento que el mismo se debe a la presencia de vacancias de oxígeno cercanas a la superficie, pero resta aún investigar las condiciones necesarias para su formación y control y básicamente muchas de sus propiedades. En esta presentación se hará un repaso de los últimos resultados obtenidos en el tema, en especial en qué compuestos fue medido y bajo qué condiciones, remarcando cómo creemos que es posible inducirlo de forma más o menos controlada. En particular, se introducirá un modelo de enlace fuerte muy simple para explicar nuevos y más precisos experimentos de fotoemisión resuelta en ángulo, ARPES. El mismo nos permitirá analizar el efecto de varios parámetros microscópicos del problema, en especial el tipo y ancho del potencial producido por las vacancias, dándonos una herramienta fundamental para interpretar de manera adecuada y novedosa las mediciones.

* En colaboración con Andrés Santander-Syro y Marcelo Rozenberg.

SP14

Cuán inocente es el óxido de cerio en la actividad catalítica de catalizadores metal-ceria: Una perspectiva teórica

Pablo G. Lustemberg *

[1]*Instituto de Física Rosario (IFIR, CONICET-UNR), Bv. 27 de Febrero, S2000EKF Rosario, Santa Fe, Argentina.*
lustemberg@ifir-conicet.gov.ar

Ceria (CeO_2) es el más significativo de los óxidos de los elementos de tierras raras en catálisis industrial, siendo su reducibilidad esencial para su función en aplicaciones catalíticas. El papel del óxido en la actividad catalítica de sistemas de nanopartículas de metal soportadas sobre ceria, todavía no se entiende completamente. Para comprenderlo, se preparan y estudian catalizadores modelos experimentales y teóricos considerablemente complejos, que incluyen partes esenciales de los sistemas reales, pero que aún pueden estudiarse a nivel atómico.

Se expondrán los resultados recientes sobre catalizadores modelo de Ni, Co y Cu soportados sobre CeO_2(111), como ejemplos de catalizadores para el reformado en seco de metano [1-3], donde se prestará especial atención a los efectos de la ceria como soporte en la actividad catalítica. También se considera el sistema Ni/ceria para la producción de hidrógeno [4]. Para ello, se analizará la estabilización de especies oxidadas (Ni^{2+}, Co^{2+} y Cu^{1+}) sobre la superficie estequiométrica (CeO_2), y metálicas (Ni^0, Co^0 y Cu^0) sobre la superficie reducida (CeO_{2-x}). En particular, se revela el origen de la notable alta actividad del sistema Co-ceria en comparación con Ni- y Cu-ceria, reduciéndose así, con este enfoque, la brecha entre catalizadores modelos y reales.

[1] Z. Liu, D. C. Grinter, P. G. Lustemberg, T. Nguyen-Phan, Y. Zhou, S. Luo, I. Waluyo, E. J. Crumlin, D. J. Stacchiola, J. Zhou, J. Carrasco, H. F. Busnengo, M. V. Ganduglia-Pirovano, S. D. Senanayake, and J. A. Rodriguez; Angew. Chem. Int. Ed. 55 (2016) 7455-7459.
[2] P. G. Lustemberg, P. J. Ramírez, Z. Liu, R. A. Gutiérrez, D. G. Grinter, J. Carrasco, S. D. Senanayake, J. A. Rodriguez, and M. V. Ganduglia-Pirovano; ACS Catal. 6 (2016) 8184-8191.
[3] Z. Liu, P. G. Lustemberg, R. Gutierrez, J. Carey, R. Palomino, M. Vorohta, D. Grinter, P. Ramirez, V. Matolin, M. Nolan, M. V. Ganduglia-Pirovano, S. Senanayake, J. A. Rodriguez; Angew. Chem. Int. Ed. (2017) DOI: 10.1002/anie.201707538, en prensa.
[4] J. Carrasco, D. López-Durán, Z. Liu, T. Duchoň, J. Evans, S. D. Senanayake, E. J. Crumlin, V. Matolín, J.
A. Rodríguez, M. V. Ganduglia-Pirovano, Angew. Chem. Int. Ed. 54 (2015) 3917-3921.

* En colaboración con M. Verónica Ganduglia-Pirovano.
Este trabajo ha sido realizado en colaboración con J. Carrasco, H. F. Busnengo, J. Carey y M. Nolan. Se agradece la cooperación con el grupo de J. A. Rodríguez del Brookhaven Natl. Lab. en EE.UU.

SP15

Efectos del espesor en películas delgadas de FeSe

M. Victoria Ale Crivillero *

División Bajas Temperaturas, Centro Atómico Bariloche, CNEA - CONICET - Instituto Balseiro, UNCuyo y CNEA, (8400) Bariloche, Argentina.
victoriaale1@gmail.com

La exploración de nuevos fenómenos emergentes y estados de la materia exóticos es un área muy activa en materia condensada. Estos estudios requieren de muestras de muy alta calidad, lo cual implica caracterizar y controlar propiedades en escalas microscópicas manteniendo homogeneidad macroscópicamente. En este trabajo estudiamos los efectos del espesor en las propiedades de películas delgadas de β-FeSe crecidas por sputtering.

Observamos una transición superconductor-aislante al reducir el espesor, para films en diferentes tipos de sustratos y en un amplio rango de temperatura de crecimiento. En la literatura hay reportes similares en films epitaxiales de FeSe, que han sido interpretados en términos de una posible transición de fase cuántica continua inducida por desorden [1-2]. En nuestras muestras la evolución de las propiedades estructurales y magnéticas no es trivial al disminuir el espesor, resultando inadecuado entenderlas en el esquema de inducción de desorden.

Notablemente, las muestras aislantes sistemáticamente presentan estructura tetragonal, son epitaxiales y presentan orden magnético. Dada la similitud con lo observado en muestras de β-Fe_4Se_5 [3], fase recientemente propuesta como pariente no superconductor del FeSe en lugar del FeTe, discutiremos la posibilidad de que pertenezcan a esa fase.

[1] R. Schneider, A. Zaitsev, D. Fuchs, H. v. Löhneysen; Phys. Rev. Lett.108 (2012) 257003.
[2] R. Schneider, A. Zaitsev, D. Fuchs, R. Fromknecht; Supercond. Sci. Technol. 26 (2013) 055014.
[3] T. K. Chen, C. Chang, H. Chang, A. Fang, C. Wang, W. Chao, C. Tseng, Y. Lee, Y. Wu, M. Wen, H. Tang, F. Chen, M. Wang, M. Wu, and D. Van Dyck; PNAS 111 (2014) 63-68

* En colaboración con L. Amigó, G. Nieva, N. Haberkorn, H. Troiani, L. Patrone, P. N. Granell, F. Golmar y J. Guimpel.

Área: Estructura atómica y electrónica de sólidos

P1

Especies de dopamina adsorbidas sobre Ag: estudio teórico

Lorena Meier, Ana Rossi Fernández, Nicolás Domancich y Norberto Castellani *

IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física - UNS, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.
E-mail: castella@criba.edu.ar

Palabras Claves: DFT, Ag, Dopamina, DDEC6

Resumen

La dopamina (DA) es un neurotransmisor que presenta un papel relevante en los sistemas nervioso central, renal y hormonal de los mamíferos. Su detección, particularmente en las especies presentes a pH sérico, es de suma importancia a nivel bioquímico. Entre los diversos sensores propuestos se pueden mencionar los voltamperométricos, con electrodos basados en nanoestructuras de Ag. En este trabajo se estudia teóricamente la adsorción de las formas zwitteriónica, protonada y desprotonada de DA sobre Ag(111) y Ag(110). Los cálculos se realizaron siguiendo la teoría del funcional de la densidad (DFT) tal como está implementada en el programa VASP (Vienna Ab-initio Simulation Program) [1]. Los substratos de Ag(110) y Ag(111) se representaron mediante un “slab” de 5 y 4 capas, respectivamente. Se tuvieron en cuenta las fuerzas dispersivas de van der Waals mediante la técnica de Grimme. La interacción substrato-adsorbato se evaluó analizando las diferencias de densidad de carga y las cargas atómicas DDEC6 [2], mostrando una reorganización importante en su distribución. Además, se estudió el efecto que provocan los campos eléctricos sobre la geometría de adsorción.

Referencias

[1] G. Kresse, J. Furthmuller; Phys. Rev. B 54 (1996) 11169.
[2] T. Manz, N. Gabaldon Limas; RSC Adv 6 (2016) 47771-47801

P2

Estudio teórico de la adsorción de dopamina-zwitterion sobre grupos epoxi de óxido de grafeno.

Ana C. Rossi Fernández, Lorena A. Meier, Nicolás F. Domancich, Norberto J. Castellani*

Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional del Sur-CONICET, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina
E-mail: castella@criba.edu.ar

Palabras Claves: Zwitterión-dopamina, Óxido de grafeno, Adsorción, DFT

Resumen

La detección de moléculas biológicas mediante dispositivos basados en formulaciones nanotecnológicas es un tema de gran interés práctico en el campo de la bioquímica y la medicina. Recientemente se han evaluado transistores de efecto de campo (FET) donde se emplea grafeno (G) u óxido de grafeno (GO) como material para el "gate" del FET, que han demostrado ser muy sensibles a las moléculas adsorbidas.

En el presente trabajo se estudia teóricamente la adsorción de la forma zwitteriónica de la dopamina (DA-Z) sobre grupos epoxi de GO. La dopamina es un neurotransmisor que presenta un papel relevante en los sistemas nervioso central, renal y hormonal de los mamíferos. 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). Las geometrías de adsorción corresponden a diferentes acercamientos de la molécula de DA-Z hacia un grupo epoxi aislado, en una configuración "stacked". También se consideró la presencia de varios grupos epoxi por celda unitaria. La energía de adsorción resultó ser exotérmica y de mayor magnitud que en el caso del grafeno sin grupos epoxi. Se produce siempre una transferencia electrónica de la molécula hacia el substrato.

P3

Dependencia de la temperatura de Kondo de átomos de Co sobre Ag(111) con la densidad de estados de superficie

María Moro-Lagares,[1,2] Joaquín Fernández*,[3] Pablo Roura-Bas,[4] Armando A. Aligia,[3] David Serrate[5]

1_Institute of Physics, Academy of Sciences, Prague, Czech Republic
2_Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Faculty of Science, Department of Physical Chemistry, Palacky University, Olomouc,Czech Republic
3_* Centro Atómico Bariloche and Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, CONICET, 8400 Bariloche, Argentina.
4_Dpto de Física, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica, CONICET, Buenos Aires, Argentina
5_Instituto de Naniciencia de Aragón, Laboratorio de Microscopias Avanzadas, University of Zaragoza, E-50018 Zaragoza, Spain
E mail: joaquinfernandeztrillini@gmail.com

Palabras Claves: Sistemas Nanoestructurados, Efecto Kondo

Resumen

Estudiamos de forma teórica y experimental la variación de la temperatura de Kondo T_K de átomos de Co sobre una superficie (111) de Ag cuando cambia la densidad de estados de superficie ρ_S. Debido a la gran longitud del vector de onda de Fermi de los estados superficiales, ρ_S en un punto dado se ve afectado por defectos colocados lejos de este punto. Hemos limpiado un área grande de la superficie de Ag(111) y medido la conductancia diferencial en un punto de superficie dada con y sin átomos de Co. De esta información obtenemos T_K y el cambio en ρ_S en la energía de Fermi a diferentes puntos de la superficie. Obtenemos que T_K varía aproximadamente de manera lineal con ρ_S.

Hemos analizado los datos basados en un modelo de Anderson SU(4) derivado de cálculos ab initio, obteniendo un buen acuerdo con los datos experimentales. Los resultados sugieren que al menos un cuarto del acoplamiento del Co con la impureza con estados extendidos se debe a estados de superficie.

P4

Interacción de adsorbatos alcalinos con una superficie de Grafeno

Evelina Andrea García[1*], Adalberto Iglesias-García[1], Marcelo Romero[1], Edith Goldberg[1,3]

[1] Instituto de Física del Litoral (IFIS Litoral, UNL-CONICET) Güemes 3450, S3000GLN, Santa Fe, Argentina
[2] Depto. Ingeniería de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, U.N.L., S3000GLN, Santa Fe, Argentina
E-mail: evelina.garcia@santafe-conicet.gov.ar

Palabras Claves: adsorbato alcalino, Grafeno, interacción

Resumen

En este trabajo se estudia desde el punto de vista teórico la interacción de átomos alcalinos (Li, Na y K) con Grafeno dentro del modelo de Anderson que nos permite tener en cuenta las propiedades químicas de los átomos interactuantes, así como también, las propiedades extendidas de la superficie a través de su matriz densidad. Se realizó una descripción realista del sistema átomo-superficie utilizando el modelo de enlace de a pares [1] y el código Fireball [2].

El trabajo apunta a completar lo previamente estudiado para el sistema Li/Grafeno donde sólo se consideró la banda π del Grafeno en una aproximación *tight-binding* [3]. Un objetivo es estudiar la posibilidad de formación de momentos magnéticos locales en dichos átomos alcalinos. En este contexto, se analizan magnitudes físicas de interés tales como la función de hibridización, la densidad proyectada en el adsorbato y el intercambio de carga con la superficie.

Se encontró que, dada la extensión de los orbitales de los átomos involucrados tanto del sustrato como del adsorbato, se requiere considerar un gran número de átomos de la superficie en la interacción. Los resultados dependen fuertemente de la estructura de banda del Grafeno. Debido a las interferencias cuánticas en la interacción adsorbato-sustrato se encontró que la función de hibridización se anula en un amplio rango de energías, posibilitando así la formación de momentos magnéticos en el adsorbato.

Referencias

[1] P. G. Bolcatto, E. C. Goldberg, M. C. G. Passeggi; Phys. Rev. B58 (1998) 5007.
[2] J. P. Lewis, K. R. Glaesemann, G. A. Voth, J. Fritsch, A. A. Demkov, J. Ortega, O. F. Sankey; Phys. Rev. B64 (2201) 195103.
[3] M. A. Romero, A. Iglesias-García, E. C. Goldberg; Phys. Rev. B83 (2011) 125411/1-125411/10.

P5

Gases de electrones bidimensionales en superficies de óxidos: nuevos resultados

Andrés Santander-Syro[1], Marcelo Rozenberg [2], Ruben Weht [3*]

[1] Centre de Sciences Nucléaires et de Sciences de la Matière (CSNSM), Université Paris-Sud and CNRS/IN2P3, Bâtiments 104 et 108, 91405 Orsay cedex, France
[2] Laboratoire de Physique des Solides, CNRS-UMR8502, Université Paris-Sud, Orsay 91405, France
[3] Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Avda General Paz y Constituyentes, San Martín (1650), Argentina
E-mail: weht@tandar.cnea.gov.ar

Palabras Claves: Gases de electrones bidimensionales, Óxidos, Superficies

Resumen

El descubrimiento, hace relativamente pocos años, de un gas de electrones bidimensional en la interfaz de dos óxidos usualmente aislantes, $LaAlO_3$ y $SrTiO_3$, es un remarcable ejemplo de cómo la reconstrucción de estados electrónicos en dimensiones reducidas puede dar lugar a nuevas propiedades, totalmente inesperadas. En dicho gas se han encontrado algunos fenómenos realmente notables y le han dado un renovado impulso al estudio de interfaces de óxidos. En un trabajo teórico-experimental reciente hemos demostrando la existencia de un gas de electrones similar simplemente en la superficie de uno de dichos óxidos, $SrTiO_3$(001). Nuestro análisis mostró que el mismo se debía a la presencia de vacancias de oxígeno. Este gas 2D fue posteriormente encontrado en otros materiales y superficies, llevando a una activa discusión sobre los presupuestos para su formación y muchas de sus propiedades. En este trabajo se hará un repaso de los últimos resultados obtenidos en el tema y fundamentalmente se introducirá un modelo de enlace fuerte muy simple para explicar nuevas mediciones de experimentos ARPES. El mismo permite analizar el efecto de varios parámetros microscópicos del problema, como son el tipo y ancho del potencial producido por las vacancias, dándonos una herramienta para interpretar adecuadamente las mediciones.

P6

Magnetorresistencia extrema en los semimetales WTe_2 y $PtBi_2$

V. F. Correa,[1]* N. Zapata,[2] S. Suárez, [1] N. Haberkorn[1]

1 Centro Atómico Bariloche (CNEA) e Instituto Balseiro (U. N. Cuyo), 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina
2 Universidad San Francisco de Quito, Ecuador.
E mail: victor.correa@cab.cnea.gov.ar

Palabras Claves: semimetales, magnetorresistencia, efecto Shubnikov-de Haas

Resumen

Los semimetales (SM) son sistemas cuyas propiedades electrónicas están a medio camino entre un metal y un aislante. A diferencia de un semiconductor, la resistividad a temperatura nula es finita. Esto se debe a que la densidad de estados electrónica en el nivel de Fermi e_F, a pesar de estar profundamente deprimida, no es nula.

En este trabajo presentamos mediciones de magnetorresistencia eléctrica en dos compuestos semimetálicos de altísima pureza: WTe_2 y $PtBi_2$. Se trata de SM con características topológicas, es decir, presentan propiedades electrónicas que están protegidas por simetría y son, hasta cierto punto, independientes del desorden, dopaje y/o defectos del material.

Se observa una magnetorresistencia positiva extremadamente alta (R(9T)/R(0) > 5000 en WTe_2), característica común a los SM topológicos. Además, esta magnetorresistencia no muestra signos de saturación hasta 16 T. En un modelo de dos tipos de portadores, esto implica una diferencia de densidad de portadores tipo hueco y tipo electrón menor al 1%.

Mediciones del efecto Shubnikov-de Haas permiten mapear la superficie de Fermi y obtener las masas efectivas.

Área: Estructura atómica y electrónica de sólidos

P7

Modelo *tight-binding* minimal para redes polaritónicas bidimensionales

Franco Mangussi,[1,2,*] Gonzalo Usaj,[1,2]
[1] *Centro Atómico Bariloche and Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 Bariloche, Argentina.*
[2] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) Argentina*
E mail: fmangussi@gmail.com

Palabras Claves: Redes de Polaritones, Estados de borde, No ortogonalidad

Resumen

Los polaritones son cuasipartículas que emergen del acoplamiento entre excitones y fotones confinados en microcavidades ópticas. Dichas cavidades pueden moldearse formando micropilares, que al ser acoplados permiten construir redes uni- y bidimensionales con geometrías arbitrarias [1]. Estas redes polaritónicas constituyen una novedosa y versátil plataforma con la que es posible emular, en el contexto de la fotónica, propiedades electrónicas de sistemas de materia condensada convencionales y a su vez diseñar hamiltonianos con propiedades de transporte peculiares [2].

En este trabajo presentamos un modelo tight-binding generalizado que permite describir, con una cantidad mínima de parámetros, la estructura de bandas y los estados de borde de redes polaritónicas bidimensionales, incluyendo el efecto de un acoplamiento espín-órbita efectivo entre grados de libertad de polarización. Este modelo basado en orbitales fotónicos no ortogonales, reproduce fielmente resultados experimentales reportados para distintas geometrías [3-6] y contribuye a entender propiedades relacionadas a la topología no trivial de esta clase de sistemas. Analizamos en particular la influencia de la no ortogonalidad de los orbitales y del acoplamiento espín-órbita fotónico sobre la polarización y dispersión de los estados de borde asociados a las bandas *s* y *p*.

Referencias

[1] T. Jacqmin, I. Carusotto, I. Sagnes, M. Abbarachi, D. D. Solnyshkov, G. Malpuech, E. Galopin, A. Lemaitre, J. Bloch, and A. Amo; PRL 112, 116402 (2014).
[2] A. Amo, J. Bloch; C. R. Physique 17 (2016) 934-945.
[3] M. Milicevic, T. Ozawa, P. Andreakou, I. Carusotto, T. Jacqmin, E. Galopin, A. Lemaitre, L. Le Gratiet, I. Sagnes, J. Bloch, and A. Amo; 2D Mater. 2 (2015) 034012.
[4] M. Milicevic, T. Ozawa, G. Montambaux, I. Carusotto,, E. Galopin, A. Lemaitre, L. Le Gratiet, I. Sagnes, J. Bloch, and A. Amo; PRL 118, 107403 (2017).
[5] D. R. Gulevich, D. Yudin, I. V. Irosh, and I. A. Shelykh; Phys. Rev. B 94, 115437 (2016).
[6] C. E. Whittaker, E. Cancellieri, P. M. Walker, D. R. Gulevich, H. Schomerus, D. Vaitiekus, B. Royall, D. M. Whittaker, E. Clarke, I. V. Iorsh, I. A. Shelykh, M. S. Skolnick, and D. N. Krizhanovskii; arxiv.org/abs/1705.03006.

P8

Propiedades Topológicas de Monocapas de Dicalcogenuros de Metales de Transición Irradiados con Luz Láser

Angiolo Miguel Huamán Gutiérrez [1,2] Gonzalo Usaj [1,2]

1 Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 Bariloche, Argentina.
2 Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET), Argentina
E- mail: angioloh@gmail.com

Palabras Clave: Floquet, TMDC, conductancia

Resumen

En este trabajo estudiamos las propiedades topológicas de las monocapas de dicalcogenuros de metales de transición (TMDC) irradiadas. Identificamos su estructura cristalina y los orbitales atómicos presentes utilizando resultados de cálculos de primeros principios (DFT). El modelo más sencillo tiene tres bandas y utiliza únicamente los orbitales dz2, dxy y dx2 del W. Se estudian modelos con interacción a primeros vecinos y hasta terceros vecinos. Se observa que el modelo de primeros vecinos describe bien las bandas sólo cerca de ciertos puntos de simetría, mientras que con interacción hasta terceros vecinos podemos describir toda la primera zona de Brillouin.

Utilizando este modelo estudiamos los efectos de un haz láser circularmente polarizado usando la teoría de Floquet. Se caracteriza la topología de las bandas de Floquet calculando algunos invariantes topológicos (números de Chern y winding). Para validar estos resultados calculamos bandas de Floquet tanto en bulk como en sistemas finitos (terminaciones zigzag y armchair), mediante la técnica de decimación para obtener los estados de bulk y borde. Finalmente calculamos la conductancia en cintas con diferentes terminaciones y discutimos el efecto de los gaps inducidos por la radiación, así como la aparición de estados de borde topológicos.

Área: Semiconductores

P9

Determinación del band gap óptico en celdas solares híbridas orgánico-inorgánico: un estudio teórico experimental.

Jorge L. Navarro*[1], Jorge P. Caram[1], Eduardo A. Albanesi[1,2], Roberto Arce[1,3]

1. Instituto de Física del Litoral CONICET-UNL. Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina.
2. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Entre Ríos, 3101 Oro Verde (ER), Argentina.
3. Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe, Argentina.
Email: Jorge.navarro@santafe-conicet.gov.ar.

Palabras Claves: Celda híbridas, Energía solar, Band gap.

Resumen

Desde hace algunos años existe un creciente interés por el estudio de celdas solares híbridas formadas por una combinación de compuestos orgánicos e inorgánicos (metálicos). Estos materiales han mostrado una gran capacidad para absorber la radiación solar y excelentes propiedades de transporte de portadores fotogenerados. Esto está permitiendo obtener como resultado, dispositivos fotovoltaicos con altas eficiencias, comparables a las tecnologías convencionales de silicio, pero con métodos de síntesis de mucho menor costo. Estos compuestos híbridos tienen la forma general ABX_3, donde A es un catión seleccionado para neutralizar la carga total del sistema y puede ser una molécula orgánica, B es un catión metálico (típicamente Pb^{2+} o Sn^{2+}) y X es un anión monovalente (Cl^-, Br^- o I^-). Resulta de gran importancia ampliar los estudios existentes relacionados con sus propiedades electrónicas y ópticas, por lo tanto, en este trabajo presentamos un estudio experimental y una modelización del material $CH_3NH_3PbI_3$ con el objetivo de obtener sus propiedades electrónicas y ópticas. Las muestras fueron obtenidas a partir de una solución precursora de $CH_3NH_3I:PbI_2$, depositadas por centrifugado y luego recocidas a 100°C por 1 hora. Los cálculos teóricos se realizaron en el marco de la teoría de la densidad funcional, incluyendo las correcciones de muchos cuerpos GW, y los efectos de la interacción espín-orbita que cobra relevancia por la presencia de elementos pesados.

P10

Magnetismo en sulfuro de estaño dopado con aluminio

Carlos I. Zandalazini[1*], Eduardo A. Albanesi[1, 2]

[1] *Instituto de Física del Litoral (CONICET-UNL), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina*
[2] *Facultad de Ingeniera, Universidad Nacional de Entre Ros, 3101 Oro Verde (ER), Argentina*
E mail: carlos.zandalazini@santafe-conicet.gov.ar.

Palabras Claves: Semiconductores magnéticos, Defectos puntuales, SnS.

Resumen

En el desarrollo de dispositivos espintrónicos, los semiconductores magneto-diluidos (SMD) se presentan como los materiales más promisorios para conseguir semiconductores ferromagnéticos operativos a temperatura ambiente. Sin embargo, trabajos reportados recientemente muestran que, en algunos sistemas, el orden magnético observado no es propiedad exclusiva del dopante magnético considerado, sino que hay una importante contribución intrínseca del defecto que éste produce en la estructura del semiconductor. Estudios realizados en sistemas dopados con elementos no magnéticos indican que la condición energética necesaria para estabilizar una configuración de espín local no nulo se consigue también con átomos que poseen capas p parcialmente ocupadas.

En este trabajo se presentarán resultados predictivos sobre el comportamiento magnético de SnS producto del dopaje con Al. Los resultados fueron obtenidos por cálculos ab initio, en el marco de la teoría del funcional de la densidad, analizando el origen de los momentos magnéticos locales, y de manera preliminar, la eventual posibilidad de acople entre ellos. Los cálculos se realizaron para dos estructuras cristalográficas del SnS (grupos espaciales 39-c2mb y 62-pnma), permitiendo así determinar la influencia de las distancias relativas entre elemento dopante y primeros vecinos, en las propiedades electrónicas y magnéticas del sistema.

Área: Materiales magnéticos. Propiedades magnéticas

P11

Orden orbital singlete en $Sr_3Cr_2O_7$ (de dos capas CrO_2)

Justin Jeanneau,[1,2] Pierre Toulemonde,[1,2] Gyorgy Remenyi,[1,2] André Sulpice,[1,2] Claire Colin,[1,2] Vivian Nassif,[1,2,3] Emmanuelle Suard,[3] Eduardo Salas Colera,[4,5] Germán R. Castro,[4,5] Frederic Gay,[1,2] Corina Urdaniz,[6,7] Ruben Weht,[6,7,8] Clement Fevrier,[1,2] Arnaud Ralko,[1,2] Claudine Lacroix, [1,2] Armando A. Aligia,[7,9,*], Manuel Núñez-Regueiro[1,2]

1_Université Grenoble-Alpes, Institut Néel, 25 Avenue des Martyrs-BP166, 38042 Grenoble, cedex 9 France
2_Centre Nationale de la Recherche Scientifique, Institut Néel, 25 Avenue des Martyrs-BP166, 38042 Grenoble, cedex 9 France
3_Institut Laue -Langevin, 71 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble cedex 9 France
4_European Synchrotron Radiation Facility, 71 rue des Martyrs, 38000 Grenoble, France
5_Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid—ICMM-CSIC, Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28049 Madrid, Spain
6_Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Avda General Paz y Constituyentes, 1650 San Martín, Argentina
7_Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Buenos Aires, Argentina
8_Instituto Sabato, Universidad Nacional de San Martín—CNEA, 1650 San Martín, Argentina
9_Centro Atómico Bariloche and Instituto Balseiro, CNEA, 8400 Bariloche, Argentina
E-mail: aligia@cab.cnea.gov.ar

Palabras Claves: orden orbital, orden magnético, hamiltoniano de Kugel-Khomskii, singlete orbital

Resumen

Se estudió experimentalmente y teóricamente el compuesto $Sr_3Cr_2O_7$, El cual consiste en bicapas alternadas de CrO_2. Mediante difracción de neutrones se encuentra un orden magnético aniferro en cada capa y ferro entre capas de acuerdo con cálculos *ab initio*. La entropía asociada a la transición magnética medida por calor específico es cercana a Rln(6). Los cálculos *ab initio* indican que los orbitales relevantes son los t_{2g} del Cr con un llenado de dos electrones por Cr y el orbital xy a menor energía. En base a esta información construimos un modelo efectivo para describir el orden magnético y orbital. El modelo preside un ordenamiento simultáneo de espín y orbitales en acuerdo con el orden magnético observado, mientras que el orden orbital más probable corresponde a una combinación singlete entre capas.

El trabajo ha sido recientemente publicado en Phys. Rev. Lett. 118, 207207 (2017).

P12

Nanoestructuras de níquel con acople magnético determinado por la morfología

Fernando Meneses*[1,2], Julieta S. Riva[1], Silvia E. Urreta[1] y Paula G. Bercoff [1,2]

[1]Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación- Universidad Nacional de Córdoba, Argentina; [2]Instituto de Física Enrique Gaviola- CONICET, Argentina.
E-mail: fmeneses@famaf.unc.edu.ar

Palabras Clave: Nanohilos, electrodeposición, propiedades magnéticas.

Resumen

Las nanoestructuras son objeto de numerosos estudios debido a su tamaño, apropiado para el desarrollo de nanotecnología, y a sus propiedades especiales, derivadas del confinamiento dimensional. En particular, los nanohilos de níquel han sido ampliamente investigados debido a su comportamiento ferromagnético, sus propiedades químicas y su bajo costo de fabricación comparado con otros materiales (como metales nobles).

En este trabajo se desarrolla una nanoestructura compuesta: nanohilos de Ni unidos en su base por una película del mismo material. Se caracterizan las propiedades estructurales del sistema por microscopía electrónica de barrido y difracción de rayos X, y las propiedades magnéticas con un magnetómetro de muestra vibrante, estudiando la dependencia de la coercitividad con el ángulo formado entre el campo aplicado y la dirección longitudinal de los nanohilos. Se encuentra que las propiedades del sistema no son una superposición de características, sino que dependen de la interacción entre los nanohilos y la lámina.

Este *cepillo* de nanohilos ofrece la posibilidad de tener nanohilos ordenados sin la presencia del molde y con conectividad eléctrica en la base. Además, al tener una mayor superficie expuesta comparada con electrodos planos, el material compuesto puede ser utilizado para el desarrollo de catalizadores de etanol más eficientes.

P13

Síntesis de materiales magnéticos blandos para su aplicación en aerogeneradores

P. di Prátula, L. A. Hernandez, S. Terny, E. C. Cardillo, M. E. Sola, M. A. Frechero*

Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, INQUISUR-CONICET.
Dpto. de Química - Universidad Nacional del Sur- CIC Bs. As.
Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires.
E-mail: mariela.sola@uns.edu.ar, frechero@uns.edu.ar.

Palabras Claves: Estatores, materiales magnéticos blandos, aerogenerador, energía eólica.

Resumen

El problema de la contaminación del medioambiente debido al uso de los combustibles fósiles es una problemática urgente a atender en nuestra sociedad. Por otra parte, el viento es una fuente de energía inagotable y segura, limpia y económica. Los recientes avances tecnológicos en turbinas eólicas de velocidad variable, en electrónica de potencia y en accionamientos de máquinas han hecho de la energía eólica una forma de energía competitiva, tanto como la energía obtenida de los combustibles fósiles.

Nuestro grupo de trabajo investiga y desarrolla materiales que aportan un avance tecnológico importante en el marco de las energías renovables.

En este trabajo presentamos la síntesis y caracterización de materiales magnéticos blandos para ser utilizados en un estator de un aerogenerador utilizando las siguientes técnicas:

- Método sol-gel: $NiFe_2O_4$ y $ZnFe_2O_4$
- Método de reacción de estado sólido: $SrTiO_3$ y compósitos del tipo $NiFe_2O_4/SrTiO_3$.

Este último se preparó con el fin de evitar los problemas de tipo físico, estructural y electrónico en el cual el acoplamiento magnetoeléctrico se puede alcanzar explotando los efectos entre fases disimiles. Todos los materiales fueron caracterizados por espectroscopia de impedancia, difracción de rayos X, Epstein cuadrado.

P14

Fases cuánticas y degeneración clásica en un antiferromagneto cuántico sobre la red de panal de abejas de dos capas

Carlos Alberto Lamas*[1,2], Marcelo Arlego[2]

[1]Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería UNLP.
[2] IFLP-CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias exactas UNLP.
E-mail: diego.g.lamas@gmail.com

Palabras Claves: Magnetismo cuántico, Frustración magnética, Sistemas fuertemente correlacionados.

Resumen

En este trabajo estudiamos la evolución de una fase de dímeros cuánticos sobre la red de tipo panal de abejas utilizando una representación de los operadores de espín en términos de operadores bosónicos [1,2]. Este modelo ha sido propuesto para describir las propiedades del material [2,3,4], por lo que el presente estudio puede ser relevante para describir el magnetismo de este y materiales con similares características. Realizando un desacoplamiento de campo medio, calculamos la relación de dispersión y a partir de la misma determinamos el gap de espín. Interesantemente, aunque el cierre de gap es calculado basados en un modelo puramente cuántico, éste ocurre sobre una curva continua en el espacio de momentos que coincide con la variedad de estados clásicos de mínima energía [5].

Referencias

[1] S. Sachdev and R. N. Bhatt, Phys. Rev. B 41, 9323 (1990).
[2] H. Zhang, C. A. Lamas, M. Arlego, and W. Brenig, Phys. Rev. B 93, 235150 (2016).
[3] O. Smirnova, M. Azuma, N. Kumada, Y. Kusano, M. Matsuda, Y. Shimakawa, T. Takei, Y. Yonesaki, and
N. Kinomura, Journal of the American Chemical Society 131, 8313 (2009).
[4] M. Matsuda, M. Azuma, M. Tokunaga, Y. Shimakawa, and N. Kumada, Phys. Rev. Lett. 105, 187201 (2010).
[5] A. Mulder, R. Ganesh, L. Capriotti, and A. Paramekanti, Phys. Rev. B 81, 214419 (2010).

P15

Estudio del efecto magnetocalórico en Films delgados de $La_{0.88}Sr_{0.12}MnO_3$

Passanante S[1*], Goijman D[1], Linares Moreau M[1], Leyva G[1 2], Albornoz C[1], Rubi D[1 2], Ferreyra[1] C, Vega D [1 2], Quintero M[1 2], Granja L[1]

[1].Departamento de Física de la Materia Condensada –CAC-CNEA, Av. Gral. Paz 1499, B1650 Villa Maipú, Buenos Aires.
[2].Escuela de Ciencia y Tecnología – UNSAM, Villa Lynch, Buenos Aires.
E mail: passanan@tandar.cnea.gov.ar

Palabras Claves: Magnetocalórico, Manganitas, Films, LSMO

Resumen

Se denomina Efecto Magnetocalórico (EMC) al cambio isotérmico de entropía y al cambio adiabático de temperatura que se produce en algunos materiales durante la aplicación de un campo magnético variable. Durante los últimos años ha despertado un gran interés en la comunidad científica debido a la posibilidad de utilizar dicho efecto para refrigeración a temperatura ambiente.

Entre todas familias de compuestos en las cuales se observa un EMC significativo, las manganitas se destacan debido a su flexibilidad a la hora de modificar sus propiedades magnéticas con diferentes estímulos. Esta característica fundamental se debe al fuerte acoplamiento entre los diferentes grados de libertad (magnético, electrónico y estructural).

En este trabajo se estudió el EMC de films delgados de $La_{0.88}$ $Sr_{0.12}$ MnO_3 crecidos sobre sustratos de Si/SiO_2 por medio de la técnica de ablación laser (PLD), con el objeto de optimizar el EMC en films para la fabricación de dispositivos. Se realizó la caracterización de sus propiedades magnéticas, de transporte eléctrico y estructural, comparando el EMC para distintos films delgados en función de su espesor y el tratamiento térmico.

P16

Interacciones de largo alcance en cadenas de spin antiferromagnéticas

Bárbara Bravo, Daniel C. Cabra, Flavia A. Gómez Albarracín, Gerardo L. Rossini*

Departamento de Física e Instituto de Física La Plata IFLP, Universidad Nacional de La Plata, 49 y 115, 1900 La Plata, Argentina.
E mail: rossini@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: interacciones dipolares, spin arbitrario, frustración, fases magnéticas ordenadas

Resumen

Estudiamos el rol de las interacciones dipolares de largo alcance en cadenas de espín antiferromagnéticas, desde espín clásico hasta el caso cuántico extremo S=1/2, incluyendo un campo magnético transverso. Combinamos varios enfoques, como minimización de la energía clásica, Monte Carlo, ondas de espín, bosonización y DMRG.

Encontramos una transición de fase entre una región dominada por la interacción dipolar y otra dominada por la interacción antiferromagnética. Las fluctuaciones térmicas y cuánticas desestabilizan el orden antes de llegar a la saturación magnética inducida por el campo externo, en ambas fases, y también cerca de campo cero enla fase antiferromagnética.

En el caso S=1/2, el análisis por bosonización y cálculos DMRG extensivos muestran que las fases clásicas permanecen presentes, con la transición a saturación ocurriendo a campos críticos significativamente menores. El diagrama de fases resulta fuertemente análogo al de una cadena de espín anisotrópica en un campo transverso.

P17

La influencia de la red atómica sobre las propiedades magnéticas: el caso de las aleaciones $CeCo_{1-x}Fe_xSi$

V. F. Correa,[1,*] A. G. Villagrán Asiares,[1] D. Betancourth,[1] S. Encina,[1] P. Pedrazzini,[1] D. J. García,[1] P. S. Cornaglia,[1] J. G. Sereni,[1] B. Maiorov,[2] N. Caroca Canales,[3] C. Geibel[3]

1 Centro Atómico Bariloche (CNEA) e Instituto Balseiro (U. N. Cuyo), 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina
2 Condensed Matter and Magnet Science, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545, EE.UU.
3 Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, D-01187 Dresde, Alemania
Email: victor.correa@cab.cnea.gov.ar

Palabras Claves: magnetostricción, fermiones pesados, magnetismo

Resumen

Al estudiar el magnetismo de sistemas sólidos, es usual despreciar la influencia de la red atómica. Esto se debe a que los sólidos, en general, son suficientemente compactos y rígidos como para que eventuales mínimas deformaciones de la red atómica afecten las propiedades magnéticas. Hay excepciones como, por ejemplo, los óxidos de Mn conocidas como manganitas que tienen asociado a la célebre magnetorresistencia colosal un efecto magnetostrictivo gigante.

En este trabajo presentamos otro sistema donde las interacciones magnetoestructurales son sumamente relevantes. Las propiedades físicas de bajas temperaturas ($T < 20$ K) de las aleaciones $CeCo_{1-x}Fe_xSi$ están dominadas por las correlaciones electrónicas. En el límite estequiométrico (**x** = 0), existe orden antiferromagnético ($T_N = 8.8$ K). Este orden se debilita conforme aumenta el contenido de Fe desapareciendo finalmente alrededor de $\mathbf{x_c} = 0.23$. Sin embargo, la magnetostricción (la deformación de la red [L(B)-L(0)]/L(0) ante un campo magnético externo B) crece continuamente con **x** alcanzando un valor extremo de $3\cdot10^{-3}$ (B = 16 T) en $\mathbf{x_c}$. Este valor es comparable a los valores más altos reportados en la literatura.

Por último, para concentraciones de Fe mayores, el efecto disminuye nuevamente.

P18

Dinámica de vórtices en monocristales de β-FeSe, efectos de irradiación con protones y de pequeñas tensiones inhomogéneas.

M. L. Amigó [1,2], N. Haberkorn[1,2], P. Pérez[1,2], S. Suárez[1,2] y G. Nieva[1,2] *

[1] Centro Atómico Bariloche (CNEA) y Instituto Balseiro (U. N. Cuyo), 8400, Bariloche, Río Negro, Argentina.
[2] Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, 8400 San Carlos de Bariloche, Argentina.
E-mail: gnieva@cab.cnea.gov.ar

Palabras Claves: Superconductores basados en Fe; FeSe; Dinámica de vórtices, Irradiación

Resumen

Reportamos características de la corriente crítica en el estado superconductor y de la resistividad en el estado normal de muestras del calcogenuro de hierro superconductor β-FeSe monocristalino.

Se muestran resultados en cristales prístinos e irradiados con protones de energía de 3MeV, con una dosis de 2.10^{16} cm^{-2}. Mínimos cambios se observan en la resistencia en el estado normal entre muestras irradiadas y no irradiadas pero la dinámica de vórtices en estado superconductor cambia sustancialmente por la inclusión de defectos al irradiar.

Ambos tipos de muestras, irradiadas y no irradiadas, fueron estudiadas libres de tensiones y embebidas en una matriz constituida por un barniz fenólico poli-vinílico no-magnético. Las tensiones producidas por la contracción térmica diferencial, ~55GPa a bajas temperaturas, cambian en un 20 % la temperatura crítica del superconductor, de 8.4 a 10.5K y modifican el anclaje de vórtices. Se encontró que la corriente crítica y su evolución temporal son características de una combinación de defectos puntuales y maclas en las muestras sin tensiones. En las muestras tensionadas la principal contribución es la de los defectos puntuales, esto indicaría que las tensiones inhomogéneas asociadas con el recubrimiento con barniz reduce la densidad de maclas en el cristal.

P19

Estudio mediante cálculos de primeros principios de las propiedades magnéticas e hiperfinas de SnO_2 co-dopado con Fe y Co

A.M. Mudarra Navarro[1], K. Nomura[2], L. Errico[1,3], C.E. Rodríguez Torres[1]

[1] *Departamento de Física e Instituto de Física La Plata (IFLP, CCT La Plata, CONICET-UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CC 67, 1900 La Plata, Argentina*
[2] PIRC, Tokyo University of Science, Japan.
[3]*Universidad Nacional del Noroeste de la Pcia. De Buenos Aires (UNNOBA), Monteagudo 2772, (2700) Pergamino, Argentina*
E-mail: dqf10204@nifty.com

Palabras Claves: Magnetismo, propiedades hiperfinas, cálculos *ab-initio*.

Resumen

En los últimos años, muchos esfuerzos se han centrado en el estudio de óxidos semiconductores de ancho GAP tales como SnO_2, TiO_2 y ZnO dopados con metales de transición (MT) [1-3]. En el caso del SnO_2, se observa que el dopaje con MT, induce ferromagnetismo a temperatura ambiente [4-6] y una mayor absorción de luz en el rango visible lo que extiende su aplicación al campo de la catálisis y otras aplicaciones tecnológicas. Trabajos experimentales muestran que, la incorporación de dos iones magnéticos (como Fe y Co) mejora la respuesta magnética del sistema [7]. Para diseñar materiales con propiedades óptimas es necesario investigar cual es el rol de cada dopante.

En el presente trabajo se ha estudiado las propiedades estructurales y magnéticas de SnO_2 co-dopado con Fe y Co, mediante cálculos *ab-initio* basados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT), método FP-LAPW (implementado en el código Wien2k [8]) para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham. Con el fin de obtener una concentración realista de dopantes se ha usado la aproximación de supercelda considerando diferentes configuraciones con y sin vacancias de oxígeno. Los resultados obtenidos se contrastan con resultados experimentales reportados en la literatura [7].

Referencias

[1] A. Punnoose, K. M. Reddy, J. Hays, A. Thurber, and M. H. Engelhard, Appl. Phys. Lett. 89, 112509 (2006).
[2] J. M. Coey, A. P. Douvalis, C. B. Fitzgerald, and M. Venkatesan, Appl. Phys. Lett. 84, 1332 (2004).
[3] A. Punnoose and J. Hays, J. Appl. Phys. 97, 10D321 (2005).
[4] J. Punnoose, A. Hays, M.H. Thurber, R.K. Engelhard, C. Kukkadapu, V. Wang, Shutthnanndan, S. Thevuthasan, Physical Review B: Condensed Matter **72**, 054402 (2005).
[5] A.M.Abdel Hakeem, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **324**, 95–99 (2012).
[6] S.A. Ahmed, S.H Mohamed, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **324**, 812–817 (2012).
[7] K. Nomura, J. Okabayashi, K. Okamura, and Y. Yamada,J. Appl. Phys. **110**, 083901 (2011).
[8] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, Wien2k: www.wien2k.at.

P20

Efecto de la modificación de la estructura local sobre las propiedades magnéticas de ferrita de Zn policristalina

Karen L. Salcedo Rodríguez[1], Silvana J. Stewart[1], Gustavo Pasquevich[1,2], Pedro Mendoza Zelis[1], Claudia E. Rodríguez Torres[1]

[1]IFLP y Departamento Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de la Plata-CCT La Plata CONICET, C.C. 67, CP 1900, La Plata, Argentina.
[2] Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, 1900 La Plata, Argentina
E-mail: klsalcedor@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: $ZnFe_2O_4$, ferritas; magnetismo

Resumen

A la ferrita de zinc ($ZnFe_2O_4$) normal se le atribuye un comportamiento antiferromagnético con una temperatura de orden de 10 K. Sin embargo, la configuración magnética que alcanza este compuesto geométricamente frustrado por debajo de esa temperatura es aún hoy objeto de debate [1]. Por otra parte, la sensibilidad de sus propiedades magnéticas a la presencia de defectos como inversión catiónica, vacancias de oxígeno y a los efectos de tamaño, la convierten en uno de las ferritas de mayor interés tanto desde la comprensión básica del sistema cómo por su potencial aplicación en espintrónica [2]. En este trabajo se analizan las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de $ZnFe_2O_4$ policristalino sometida tratamientos térmicos bajo atmósfera de vacío a diferentes temperaturas hasta 620º C, mediante difracción de Rayos X, magnetometría, espectroscopia Mössbauer, absorción de rayos X (XANES y XMCD). Los resultados indican que la inversión parcial que se observa en la muestra de partida desaparece como consecuencia del tratamiento térmico en un rango intermedio de temperaturas. Los cambios observados en las propiedades magnéticas para las muestras tratadas a temperaturas superiores a 400 º C están asociadas a la generación de vacancias de oxígeno.

Referencias

[1] K. Kamazawa, Y. Tsunoda, H. Kadowaki, K. Kohn. Magnetic neutron scattering measurements on a single crystal of frustrated ZnFe2O4. Phys. Rev. B 68, 024412 (2003).
[2] C. E. Rodríguez Torres, G. A. Pasquevich, P. Mendoza Zélis, F. Golmar, S. P.Heluani, Sanjeev K. Nayak, Waheed A Adeagbo, WolframHergert, Martin Hoffmann, Arthur Ernst, P. Esquinazi, and S. J. Stewart. Oxygen-vacancy-inducedlocal ferromagnetism as a driving mechanism in enhancing the magnetic response of ferrites. Phys. Rev B 89(10):104411, (2014)

P21

Estudio de las nanopartículas core-shell Fe/Fe_3O_4: cálculos ab-initio y técnicas experimentales

A.M. Mudarra Navarro[1, 2], G.A. Muñoz Medina[2], A.V. Gil Rebaza[1,2,3*], L. Errico[1, 2,4] M. Fernández van Raap[1,2] F. Sánchez[1,2]

1 Instituto de Física La Plata, IFLP CCT La Plata CONICET, La Plata, Argentina.
2 Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata – Argentina.
3 Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos (GEMyDE), Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata – Argentina.
4 Universidad Nacional del Noroeste de la Provincia de Buenos Aires (UNNOBA), Pergamino, Argentina
E-mail: arlesv@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: Nanopartículas, cálculos ab-initio, propiedades magnéticas

Resumen

Las nanopartículas (NP) core-shell Fe/Fe_3O_4@CitNa presentan potenciales aplicaciones en terapias oncológicas debido a su alta magnetización de saturación (Ms) proveniente de su núcleo de hierro, al cual se lo dota de biocompatibilidad con el recubrimiento de magnetita (Fe_3O_4) [1]. El núcleo de Fe se obtiene por mecano-síntesis, mientras que el recubrimiento de Fe_3O_4 por coprecipitación asistida por ultrasonido [4].

En el presente trabajo se estudia las propiedades estructurales, magnéticas e hiperfinas de la NP core-shell Fe/Fe_3O_4 por medio de la interface Fe-Fe_3O_4. Para tal fin, se han realizado cálculos *ab-initio* basado en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) [3] y la aproximación de pseudopotenciales y ondas planas (QuantumEspresso [4]) para el estudio estructural y el método FP-LAPW (Wien2k [5]) para el estudio de las propiedades magnéticas e hiperfinas. Los resultados obtenidos han sido comparados con medidas experimentales tales como VSM, ZFC-FC y ciclos H-M a diferentes temperaturas para caracterizar las propiedades magnéticas, y además se ha usado difracción de electrones y TEM para verificar la presencia de la capa de Fe_3O_4 y el tamaño del sistema estabilizado, respectivamente.

Referencias

[1] H. Markides, M. Rotherham, A.J. El Haj; J. of Nanomaterials 2012 (2012) 1-11.
[2] S. E. Jacobo, P. G. Bercoff, C. A. Herme, L. A. Vives, Mater. Chem. Phys. 157 (2015) 124-129.
[3] R. M. Martin, Electronic Structure, Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, New York, U.S.A., 2004.
[4] P. Giannozzi, S. Baroni, et al., J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 395502 (19pp)
[5] P. Blaha, K. Scwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, Wien2k, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Tech. Universitä Wien, Austria, 1999, http://www.wien2k.at

P22

Estudio teórico de la aleación FeRh

María Julia Jiménez[1*] Gabriela Cabeza[1]

[1]*Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*
E mail: mjuliajimenez@uns.edu.ar

Palabras Claves: FeRh – Magnetismo - DFT

Resumen

En 1938 Fallot [1] descubre que la aleación ordenada FeRh (B2- Tipo CsCl) experimenta una transición de fase magnética de primer orden AFM-FM a medida que la temperatura aumenta y supera la $T_{transición}$. Esta aleación ha sido estudiada debido a sus potenciales aplicaciones tecnológicas [2-4].

En este trabajo se caracteriza la aleación FeRh y se estudian sus propiedades estructurales, energéticas y magnéticas, empleando el código VASP [5]. En la fase FM, los átomos de Fe y Rh adquieren una magnetización local de ~3 y 1 μ_B respectivamente, mientras que en la fase AFM ~±3 y 0 μ_B. La caracterización estructural muestra una distorsión de la celda tetragonal de la fase AFM (relación c/a = 1.25) a cúbica en la FM con 2.5% de aumento en el volumen en dicha transición y con una diferencia de energía de ~70 meV. Estos resultados están en acuerdo con datos de literatura del último año, donde se reporta que la celda AFM cúbica no representa el mínimo global de energía, sino que existen distorsiones ortorrómbicas y tetragonales [6,7].

Cálculos de estructuras de bandas de fonones, mediante el código PHONOPY [8] muestran inestabilidad en fonones para estructuras AFM cúbicas, mientras que para estructuras tetragonales no se observa este comportamiento inestable.

Área: Propiedades químicas, estructurales, termodinámicas, eléctricas

P23

Efecto de la modificación superficial de la sílica en la sorción de 4-formilaminoantipirina: estudio DFT

Andrés Díaz Compañy[1,2], Graciela Brizuela[1], Alfredo Juan[1], Sandra Simonetti[1,3]

[1]Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.
[2]Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), Calle 526 e/10 y 11, 1900 – La Plata, Argentina.
[3]Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 461, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.
E-mail: ssimonet@uns.edu.ar

Palabras Claves: Adsorción, Funcionalización, DFT

Resumen

Se estudia el papel que desempeña la modificación superficial en la adsorción de 4-formilaminoantipirina (FAA) sobre la superficie de β-cristobalita (001) mediante simulaciones realizadas con el programa Viena ab initio Simulation Package (VASP). Partiendo de los resultados de la molécula FAA en interacción con una superficie deshidroxilada, se estudia además la interacción con una superficie completamente hidroxilada y una superficie funcionalizada con surfactante de cloruro de benzalconio (BC). Los cálculos sugieren que la tendencia para la adsorción preferencial de FAA sobre las superficies de la sílica es: deshidroxilada > hidroxilada > funcionalizada con BC. Enlaces del tipo puente hidrógeno causan la principal contribución a la unión mientras que las fuerzas de dispersión presentan una contribución adicional independientemente de si el fármaco está unido a la superficie hidroxilada o funcionalizada con el grupo BC. La adsorción tiene lugar principalmente a través del átomo de nitrógeno en el anillo heterocíclico y, los grupos funcionales carbonilo y amina. El surfactante BC reduce el número de enlaces de hidrógeno formados y disminuye la interacción atractiva molécula-superficie, lo que resultaría útil para prevenir la aglomeración de las partículas y podría favorecer la liberación del fármaco en terapias que requieran una administración más rápida pero controlada.

P24

Estudio DFT comparativo de la absorción de 5- fluorouracilo sobre carbón activado puro y dopado con aluminio

Gabriel Román[1], Graciela Brizuela[1], Alfredo Juan[1], Sandra Simonetti[1,2*]

[1]Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.
[2]Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 461, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.
E-mail: ssimonet@uns.edu.ar

Palabras Claves: Adsorción, Funcionalización, DFT

Resumen

Nuestro estudio computacional pretende ayudar a abrir nuevas rutas para diseñar materiales eficientes como sistemas de administración de fármacos. De acuerdo con nuestros resultados (VASP), una baja energía de adsorción y la gran distancia molécula-superficie sugieren que la molécula de 5- fluorouracilo no se adsorbe apreciablemente en la superficie carbonada pura y sufre solamente adsorción física debido a las interacciones débiles de van der Waals que ocurren entre la molécula y la superficie. Sin embargo, la interacción del anillo de la molécula de 5-fluorouracilo con la superficie modificada con aluminio conduce a una energía de absorción más baja. La molécula se absorbe en la zona modificada ya que el aluminio contribuye a la interacción con los grupos polares del 5- fluorouracilo. La adsorción de la molécula en la superficie pura es desfavorable, por lo que los resultados de nuestro estudio sugieren que la funcionalización con aluminio disminuye la energía de sorción del carbón activado potenciando sus interacciones con el adsorbato, mejorando así sus propiedades de absorción.

P25

Mecanismos de nucleación y crecimiento en películas de Fe sintetizadas por electroquímica sobre distintos sustratos de Al

M. Soledad Aprea[*1], Fernando Meneses[1, 2] Julieta. S. Riva[2], Paula G. Bercoff[1, 2]

[1]FaMAF- UNC, Medina Allende, Ciudad Universitaria, X5000HUA, Córdoba, Argentina.
[2]IFEG- CONICEF, Av. Medina Allende, Ciudad Universitaria, X5016LAE, Córdoba, Argentina.
E-mail: soleaprea@gmail.com

Palabras Clave: películas de Fe, electrodeposición, nucleación, crecimiento.

Resumen

En este trabajo se sintetizaron películas de hierro por electrodeposición sobre dos tipos de sustrato de aluminio (uno liso, pulido a espejo, y otro rugoso) empleando potenciales similares. Las láminas obtenidas se caracterizaron por difracción de rayos X, microscopía electrónica, magnetometría y se estudiaron los mecanismos de nucleación y crecimiento cristalino analizando las curvas de transitorios de corriente medidas durante la electrodeposición.

Se encontró que las láminas están compuestas mayoritariamente de hierro puro, con estructura bcc y textura (002), encontrándose en las superficies distintos óxidos de hierro, de variada morfología. El estudio de las propiedades magnéticas permitió determinar que el eje de fácil magnetización coincide con el eje paralelo al plano de las películas. Pudo determinarse que, en la película sintetizada sobre sustrato liso, que se desprende fácilmente del mismo, se desarrollan varios mecanismos de nucleación, mientras que la lámina crecida sobre sustrato rugoso queda adherida fuertemente al Al y presenta un único mecanismo. El modelo tridimensional de régimen progresivo controlado por el volumen de difusión es común a ambos tipos de muestras, pero con distintos valores de parámetros relevantes.

P26

Cálculo DFT del espectro fonónico y propiedades asociadas en KH_2PO_4 (KDP)

Rodrigo E. Menchón[1]*, Giuseppe Colizzi[2], Conrad Johnston[2], Federico Torresi[1], Jorge Lasave[1], Sergio Koval[1], Jorge Kohanoff [2], y Ricardo Migoni[1]

1 Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario, 27 de Febrero 210 Bis, 2000, Rosario, Argentina.
2 Atomistic Simulation Centre, Queen's University Belfast, Irlanda del Norte, Reino Unido.
E-mail: menchon@ifir-conicet.gov.ar

Palabras Claves: KDP, ferroeléctricos, fonones, transición de fase

Resumen

Mediante cálculos ab initio basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), estudiamos los fonones del compuesto KH_2PO_4 (KDP) en la fases Ferroeléctrica y Paraeléctrica. Se determinaron los fonones en el centro de la zona de Brillouin y se los clasificó por simetría. Se encuentra un buen acuerdo con los resultados experimentales de espectros Raman e infrarrojo. Además, se calcularon las curvas de dispersión fonónicas para ambas fases empleando el método de "frozen phonons" con el código ab initio VASP. Con estos resultados se obtuvieron la densidad de estados fonónica parcial y total y el calor específico, este último en buen acuerdo con datos experimentales. En la fase paraeléctrica, se analizó el acoplamiento entre el modo ferroeléctrico y otros modos de vibración de baja frecuencia que podrían ser importantes para la transición FE-PE.

P27

Estudio de las propiedades físicas de nanoclusters de Pt en su transición hacia el sólido

A. S. Maldonado[1,2 *], G. F. Cabeza[3], S. B. Ramos[1, 2]

[1] Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas – CONICET – Universidad Nacional del Comahue (UNCo), Buenos Aires 1400, Neuquén, Argentina
[2] Depto. de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue (UNCo), Buenos Aires 1400, Neuquén, Argentina
[3] Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. Alem 1253, Bahía Blanca, Argentina
E-mail: abel.maldonado@fain.uncoma.edu.ar

Palabras Claves: nanoclusters, Pt, propiedades termofísicas, modelado *ab initio*

Resumen

Los nanoclusters representan un nuevo estado de la materia, con propiedades intermedias entre las de los átomos y el sólido, sensibles al tamaño y geometrías de los mismos. En particular, el estudio y entendimiento de la estructura y propiedades de los nanoclusters de metales transición revisten gran interés actual por sus importantes aplicaciones vinculadas a catálisis y almacenamiento magnético.

En este trabajo nos interesa investigar mediante métodos de modelado ab initio, las propiedades estructurales, cohesivas, magnéticas y vibracionales de clusters de Pt_n (n = 2, 4, 13, 19, 55, 79, 85 y 147) y analizar cómo éstas evolucionan hacia el comportamiento típico del sólido. Para las configuraciones estudiadas observamos que a medida que crece el tamaño del cluster, la energía de cohesión se incrementa y el momento magnético se reduce, correlacionándose con un crecimiento en las distancias promedio de enlace. Las densidades de estado vibracionales muestran un comportamiento muy diferente al del sólido, con presencia de estados discretos, que dan lugar a desviaciones con respecto al modelo de Debye para el calor específico a volumen constante a bajas temperaturas. Estimaciones de la temperatura de Debye indican valores inferiores a las calculadas para el sólido.

P28

Cálculo de la estructura electrónica y fonones para el estudio de los half-metallic d^0 LiN, NaN y KN: influencia del intercambio-correlación

A.V. Gil Rebaza[1,2*], L. Errico[1, 3], Eitel L. Peltzer y Blancá[2]
[1] Instituto de Física La Plata, IFLP CCT La Plata CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata – Argentina.
[2]Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos (GEMyDE), Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata – Argentina.
[3] Universidad Nacional del Noroeste de la Provincia de Buenos Aires (UNNOBA), Pergamino, Argentina.
E-mail: arlesv@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: half metallic, cálculos ab-initio

Resumen

Los compuestos half-metallic presentan la característica de que una de sus bandas de espín tiene comportamiento metálico mientras que la otra hace como un semiconductor. Por este motivo han sido propuestos para el desarrollo de dispositivos de almacenamiento de datos masivo, espintrónica y canales de espín [1].

En el presente trabajo por medio de cálculos ab-initio basados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) [2], se ha estudiado los half-metallic binarios d^0 LiN, NaN y KN, con diferentes niveles de aproximación de la funcional de intercambio-correlación tales como LDA, GGA (PBE), metaGGA (TB-mBJ) y funcionales híbridas (HSE06), además de la aproximación de cuasipartícula (scGW y G_0W_0) con la finalidad de obtener una mejor descripción de la banda semiconductora. Además, se ha estudiado la estabilidad estructural de los compuestos a través de la dinámica de la red o fonones usando la aproximación de respuesta lineal. Se ha usado el método de ondas planas y pseudopotenciales (QuantumEspresso [3]) y el método FP-LAPW (Wien2k [4]) para la solución autoconsistente de las ecuaciones.

Referencias

[1] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 2024.
[2] R. M. Martin, Electronic Structure, Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, New York, U.S.A., 2004.
[3] P. Giannozzi, S. Baroni, et al., J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 395502
[4] P. Blaha, K. Scwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, Wien2k, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Tech. Universitä Wien, Austria, 1999, http://www.wien2k.at

P29

Transiciones de fase y propiedades dieléctricas y ferroeléctricas del $BaTiO_3$ dopado con Mg.

R. Machado[1], A. Di Loreto[1,2], A. Frattini[1,2], M. Sepliarsky[1], M. G. Stachiotti[1]

1 Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario-CONICET, 27 de Febrero 210 Bis, 2000 Rosario, Argentina
Área Física, Dpto. de Química Física, FCByF, Universidad Nacional de Rosario, 2000 Rosario, Argentina
E-mail: machado@ifir-conicet.gov.ar

Palabras Claves: simulaciones atómicas, ferroeléctricos, perovskitas, transiciones de fase

Resumen

En este trabajo realizamos un estudio teórico-experimental del comportamiento $BaTiO_3$ dopado con Mg. En particular analizamos los efectos de la presencia de Mg en las transiciones de fases y en las propiedades dieléctricas y ferroeléctricas del compuesto. Para esto, sinterizamos pastillas de $BaTiO_3$ dopado con Mg mediante la ruta convencional en estado sólido. El estudio del comportamiento de la permitividad dieléctrica con la temperatura, reflejó que la temperatura de transición de la fase tetragonal a la cúbica aumenta con el agregado de Mg. Para obtener una explicación de este comportamiento, simulamos mediante el método de dinámica molecular el efecto de esta adición. Obtuvimos que si el Mg^{+2} ocupa la posición del Ba^{+2}, la temperatura de la transición cúbica-tetragonal aumenta mientras que si se ubica en la posición del Ti^{+4} esta temperatura disminuye. Estos resultados permiten concluir que el Mg^{+2} tiende a sustituir al Ti^{+4}.

P30

Reactividad y distorsión cristalina de la titania dopada con N y C

Cecilia I. N. Morgade[1,2] *, Gabriela F. Cabeza[1]

[1] *Departamento de Física, Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, CONICET, Universidad Nacional del Sur, Av Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad Regional Bahía Blanca, Universidad Tecnológica Nacional, 11 de abril 461, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*
E mail: cmorgade@uns.edu.ar.

Palabras Claves: titania - reactividad interna - dopado – DFT+U.

Resumen

Es posible encontrar desde hace tiempo en la literatura que la titania (TiO_2) dopada con no metales como el N y el C ha mostrado mejoría de la actividad catalítica por disminución tanto de la banda prohibida como del porcentaje de recombinación de portadores de carga [1-3]. Sin embargo, no ha sido estudiado en detalle cómo la presencia del átomo dopante distorsiona la estructura cristalina dependiendo de la ubicación del mismo en el cristal. En particular los estudios existentes han sido realizados en fase anatasa prioritariamente, a pesar de conocerse la transformación de fase que sufre la titania a elevadas temperaturas, condiciones frecuentemente alcanzadas en la actividad industrial. El presente trabajo presenta el estudio teórico empleando el código VASP [4] de la titania tanto en fase anatasa como en fase rutilo dopada con N y C en sitios sustitucionales de O y Ti e intersticiales para el caso del C. Se muestran las estructuras internas peculiares productos de los dopados, la relación de la presencia de las mismas con las cargas de los átomos implicados, lo que sin duda afecta el comportamiento óxido-reductor de los diferentes sistemas y la energía involucrada para cada tipo de dopado.

Referencias

[1] A. Zaleska, Recent papers on Engineering 2 (2008) 157.
[2] O. Diwald, T. Thompson, E. Goralski, S. Walck, J. Yates, J. Phys. Chem. B108 (2004) 52.
[3] D. Dolat, S. Mozia, B. Ohtani, A. Morawski, Chem. Eng. J. 225 (2013) 358.
[4] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54 (1996) 11169.

Área: Superconductividad

P31

Efecto del desorden en la red de centros de anclaje sobre la red de vórtices superconductores

Sarmiento Chavez A. C.[1*], Montón C.[2], Giuliani J.[2], Cadenas J.[2], Guimpel J. [1]

[1] División Bajas Temperaturas, Centro Atómico Bariloche, CNEA - CONICET - Instituto Balseiro, UNCuyo y CNEA, (8400) Bariloche, Argentina.
[2] Department of Physics and Astronomy, University of Texas at San Antonio, 78249 TX, USA.
E- mail: anasarmiento9@gmail.com

Palabras Claves: Vórtices, Centros de anclaje, Desorden, Conmensuración.

Resumen

El diseño y construcción por litografía de redes de defectos ordenados en superconductores ha permitido el estudio de los efectos de la conmensuración entre esta red y la red de los vórtices superconductores. Se ha visto que tanto la configuración estática como la dinámica se ven afectadas. Sorprendentemente, un aspecto que ha sido muy poco estudiado es el del desorden en la red de defectos. Hemos fabricado films superconductores con redes de agujeros submicrométricos con desorden controlado, depositando por sputtering films de Nb sobre membranas porosas de alúmina. En estas membranas se controló el grado de desorden de las redes de poros durante el proceso de anodizado. Las mediciones de respuesta magnética muestran claramente efectos de matching entre las redes de agujeros y vórtices. Se relacionarán las características de este matching con el desorden de la red de agujeros.

Área: Síntesis de nuevos materiales de estado sólido

P32

Nuevos materiales conductores iónicos híbridos con aplicación como electrolitos sólidos

E. Cardillo, S. Terny, L. Hernandez, P. di Prátula, M. E. Sola, M.A. Frechero*

INQUISUR - Dpto. de Química - Universidad Nacional del Sur- CONICET.
Dpto. de Química - Universidad Nacional del Sur- CIC Bs. As.
Av. Alem 1253, CP: 8000, Bahía Blanca, Argentina.
E mail: *frechero@uns.edu.ar*

Palabras Claves: electrolitos sólidos, líquidos iónicos.

Resumen

Los vidrios y vitroceramicos de óxidos, que contienen Litio en su composición, han sido extensamente estudiados en las últimas décadas debido a su estabilidad térmica y alta conductividad iónica dada por el ion Litio. Sin embargo, aún es necesario mejorar los valores de conductividad a temperatura ambiente de estos materiales para su aplicación en baterías de litio de estado sólido.

Los líquidos iónicos (LI) tienen propiedades interesantes tales como alta estabilidad térmica, buenas propiedades mecánicas y extremadamente baja presión de vapor a temperaturas moderadas. Se ha demostrado experimentalmente que la adición de LI a vidrios conductores iónicos aumenta notablemente su conductividad.

En este trabajo reportamos la síntesis y caracterización de materiales híbridos compuestos por: materiales vítreos y vitroceramicos con matrices basadas en [$MgO/P_2O_5/Bi_2O_3$] modificados con óxido de litio y el líquido iónico [BMIM][PF_6].

Buscamos desarrollar, por el método de quenching, conductores iónicos sólidos cuyos valores de conductividad superen a los actualmente alcanzados del orden de [10^{-4}- 10^{-3}] $S.cm^{-1}$ a temperatura ambiente. Y caracterizamos los materiales obtenidos por las siguientes técnicas experimentales: Difracción de Rayos X, Calorimetría Diferencial de Barrido, Análisis Térmico Diferencial, Densidad por el método del desplazamiento, Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier, Espectroscopia de UV-vis y Espectroscopia de Impedancia.

P33

Películas de germaneno en Au(111) y Al(111)

Emanuel Martínez[1], Lara M. Solis[1], Esteban D. Cantero[2], Javier D. Fuhr[2], M. Luz Martiarena[2,*], Oscar Grizzi[2], Esteban A. Sánchez[2]

Laboratorio de Física de Superficies, Gerencia de Física, Centro Atómico Bariloche, Avda. Ezequiel Bustillo 9500, 8400 S.C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.
[1]Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo; [2]Comisión Nacional de Energía Atómica – CONICET.
E-mail: mluz@cab.cnea.gov.ar

Palabras Claves: germaneno, superficie, Au(111), Al(111).

Resumen

En este trabajo estudiamos la formación de películas de Ge crecidas por evaporación bajo condiciones de UHV en superficies de Au(111) y Al(111). La cristalografía y composición de la superficie se analizó mediante varias técnicas experimentales incluyendo microscopía de efecto túnel (STM), espectrometría de iones por tiempo de vuelo (TOF-DRS), difracción de electrones de baja energía (LEED), espectroscopia de pérdida de energía de electrones (EELS), y espectroscopia de fotoelectrones (UPS); y se los compararon con cálculos de Density Functional Theory (DFT). Los patrones LEED indican fases muy ordenadas en ambos sustratos. Para Au(111) el STM también muestra una celda unidad muy grande de 5x8, pero no se observó la estructura tipo panal de abeja característica del germaneno propuesto por los diferentes grupos. Además, la alta sensibilidad de la técnica TOF-DRS nos permitió mostrar la presencia de átomos de Au en la película y la difusión de los átomos de Ge en la muestra. Por otro lado, los resultados preliminares obtenidos para el crecimiento de menos de una monocapa de átomos de Ge en Al(111) muestra una estructura 3x3 sin difusión de los átomos de Ge en la muestra de Al.

Área: Técnicas de caracterización

P34

Propiedades eléctricas locales de films mesoporosos de TiO_2 infiltrados con nanopartículas de Au

Mercedes Linares Moreau,[1,2] Leticia P. Granja, [1*] Eduardo Martínez,[3] Ianina Violi,[4] M. Cecilia Fuertes,[4] Laura López Mir,[5] Carmen Ocal,[5] Pablo Levy,[1] Galo J. A. A. Soler-Illia[6]

[1] Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET
[2] Instituto de Tecnología Jorge A. Sabato - UNSAM
[3] Departamento de Eletrônica Quântica (DEQ), Universidad de Campinas (Brasil)
[4] Gerencia Química, CAC - CNEA
[5] Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)
[6] Instituto de Nanosistemas, UNSAM
**E-mail: granja@tandar.cnea.gov.ar*

Palabras claves: CAFM, Kelvin Probe, óxido de titanio mesoporoso, nanoparticulas de Au

Resumen

Los films delgados mesoporosos (FDMP) de TiO_2 presentan un gran potencial de aplicación en varios campos, tales como catálisis, óptica, biomateriales y sensores.[1,2] La infiltración de los mismos con nanopartículas (NPs) permite explotar las propiedades derivadas del tamaño y del confinamiento protegiéndolas simultáneamente del entorno.[3-5] En este trabajo se presenta una caracterización de FDMP de TiO_2 infiltrados con NPs de Au mediante distintas técnicas de microscopía de barrido por sonda.

Los FDMP fueron sintetizados por sol-gel y depositados por dip coating sobre un sustrato de Si conductor. La infiltración con NPs de Au se realizó mediante métodos de reducción suave de $AuCl_4^-$.[6] Las características morfológicas de las muestras se estudiaron por SEM y elipsoporosimetía ambiental.

Por medio de microscopía de fuerza atómica con punta conductora (CAFM), microscopía de sonda Kelvin (KPFM) y el modo de Contraste de Capacitancia (CCM) se pudieron correlacionar las propiedades eléctricas locales con la morfología del sistema. Bajo ciertas condiciones se encontró que es posible modificar localmente la resistencia eléctrica mediante barridos de CAFM con diferentes voltajes. A través de la técnica de KPFM y CCM se pudieron identificar nano-islas de Au enterradas bajo la superficie del FDMP que no contribuyen a la conducción entre la punta y el sustrato.

Referencias

[1] P. Innocenzi, L. Malfatti; Chem. Soc. Rev. (2013) Vol. 42: 4198-4216.
[2] P. C. Angelome, L. M. Liz-Marzań; J. Sol−Gel Sci. Technol. (2014) Vol. 70: 180−190.
[3] A. Wolosiuk, E. D. Martínez, V. Tognalli, M. Granada, M. C. Fuertes, H. Troiani, S. A. Bilmes, A. Fainstein, G. J. A. A. Soler-Illia; ACS Appl. Mater. Interfaces (2014) Vol. 6: 5263- 5272.
[4] L. P. Granja, E. D. Martínez, H. Troiani, C. Sanchez, G. J. A. A. Soler Illia; ACS Appl. Mater. Interfaces (2017) Vol. 9: 965–971.
[5] M. Linares Moreau, L. P. Granja, M. C. Fuertes, E. D. Martinez, V. Ferrari, P. Levy, G. J. A. A. Soler-Illia; *J. Phys. Chem. C* (2015) Vol. 119: 28954.
[6] V. M. Sańchez, E. D. Martínez, M. L. Martínez Ricci, H. Troiani, G. J. A. A. Soler-Illia; J. Phys. Chem. C (2013) Vol. 117: 7246−7259.

Área: Aplicaciones

P35

Adsorción de catechol sobre superficies de TiO_2-B (001), (100) y $H_2Ti_3O_7$ (100) para aplicaciones en DSSCs

Estefania German [1]*, Ricardo Faccio [2], Álvaro W. Mombrú [2]

1 IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física-UNS, Av. Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina.
2 Centro NanoMat-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay
E-mail:egerman@uns.edu.ar

Palabras Claves: Polimorfos TiO_2, DFT, Celdas Solares, Titanato de Hidrógeno

Resumen

Las superficies de titanato de hidrógeno ($H_2Ti_3O_7$) y del polimorfo TiO_2-B fueron identificadas experimentalmente es los últimos años y son superficies potenciales para aplicaciones en celdas solares sensibilizadas por colorantes (DSSCs). Para estudiar su desempeño, evaluamos mediante cálculos DFT -implementando el parámetro de Hubbard "U"- la adsorción del colorante modelo catechol sobre diferentes sitios y en diferentes configuraciones. Calculamos tanto geometría y energía de adsorción como transferencia electrónica del colorante al adsorbente semiconductor, y orbitales frontera. Los resultados indican que la superficie (100) de titanato de hidrógeno conteniendo un defecto tipo vacancia de oxígeno y la superficie (100) de TiO_2-B presentan energías de adsorción favorables. Además, un alineamiento adecuado del nivel energético vuelve a ambas superficies óptimas para una transferencia electrónica directa por medio de excitación, desde el catechol a la banda de conducción de los semiconductores, con bandas ubicadas en la región Visible del espectro electromagnético. Por último, el alineamiento de la estructura de banda indica un incremento en el voltaje de circuito abierto, en referencia al potencial par redox I_2/I_3^-. Todas estas características hacen del titanato de hidrógeno ($H_2Ti_3O_7$) y del polimorfo TiO_2-B compuestos prometedores para aplicaciones DSSC.

P36

Modelado de catalizadores de clusters de Pd_n (n=1-10) y monocapa de Pd sobre SnO_2 (110) para su aplicación como sensores de H_2

Estefania German [1]*, Valeria Verdinelli [2], Carolina Pistonesi [1], M. Estela Pronsato[1]

1 IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física-UNS, Av. Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina
2 IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Química-UNS, Av. Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina
E-mail:egerman@uns.edu.ar

Palabras Claves: SnO_2, Paladio, DFT, Catalizador

Resumen

La molécula de hidrógeno es utilizada y estudiada en el mundo como fuente de energía limpia y sustentable en celdas de combustible y otros generadores. Hay que tener en cuenta que el H_2 tiene varios aspectos que no deben ser pasados por alto, como su fácil explosividad y baja energía de ignición. Estas cuestiones hacen completamente necesario el uso de un sensor de hidrógeno para detectar fugas en el almacenamiento y transporte.

Mediante metodología DFT modelamos la superficie estequiométrica (110) de óxido de estaño (SnO_2) y estudiamos la adsorción de clusters de Pd_n (n=1-10) y de una monocapa de Pd con el fin de ser empleados como superficies detectoras de H_2. Los resultados muestran que la adsorción de los clusters sobre SnO_2 es espontánea con valores de energía de adsorción óptimos, presentando una preferencia energética por el cluster Pd_5. También se estudió la energía necesaria para el desarmado de éstos (Pd_{n-1}+Pd_1)/SnO_2, la cual indica una tendencia positiva favoreciendo la formación de la monocapa, ésta presenta una energía de adsorción mucho más favorable que la del Pd_5. Con nuestro estudio preliminar esperamos encontrar las condiciones óptimas para la detección de H_2 utilizando una superficie de SnO_2 conteniendo una monocapa de Pd.

P37

Estudio teórico y experimental de adsorción y disociación de etanol sobre superficies de β-Mo_2C dopada con Platino

Chasvin Orradre María Nilda[1], Diez Alejandra [1], Pronsato Estela [2], Johánek Viktor [3], Volpe María Alicia [4]*, Pistonesi Carolina [2]

[1] Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, e INQUISUR (UNS-CONICET), Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina

[2] Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur e IFISUR (UNS-CONICET), Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina

[3] Department of Surface and Plasma Science, Charles University, Prague, Czech Republic.

[4] Planta Piloto de Ingeniería Química, UNS-CONICET, Camino Carrindanga Km 7, 8000 Bahía Blanca.

E-mail: mvolpe@plapiqui.edu.ar

Palabras Claves: Mo_2C – Pt – Etanol - DFT

Resumen

Una fuente interesante para generar hidrógeno son los alcoholes, en especial el etanol debido a su baja toxicidad y a su fácil obtención. En este contexto se estudia la adsorción y la disociación de etanol sobre carburo de molibdeno dopado con platino, para la producción de hidrógeno. Nuestro objetivo es encontrar un catalizador eficiente, que no se desactive y que opere a temperatura relativamente baja.

Desde el punto de vista experimental, se preparó un catalizador de β-Mo_2C mediante reducción de sales de Mo y carbón. Se realizó el dopado con platino mediante impregnación húmeda y posterior reducción. Luego se caracterizó la muestra por sortometría de N_2 a 77K, Reacción de H_2 a Temperatura Programada, Difracción de Rayos X (aplicando el método Rietveld) y Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X.

Mediante metodología DFT se modeló la superficie β-Mo_2C (001) y el efecto en la distribución de cargas superficial producido por la presencia de platino. Sobre esta superficie se estudió la adsorción y disociación de etanol. Los resultados encontrados fueron comparados con valores obtenidos previamente para la superficie sin dopar. Del análisis se puede inferir que la presencia de platino favorece tanto la adsorción como la disociación de etanol.

P38

Carbón activado a partir de biomasa para aplicaciones electroquímicas

José J. Arroyo Gómez[1], Dimar Villarroel Rocha[1], Carlos Martinez Huitle[2], Karim Sapag[1]

[1] Laboratorio de Sólidos Porosos (LabSoP), INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Av. Ejército de los Andes 950, 5700, San Luis, Argentina.
[2] Laboratório de Eletroquímica Ambiental e Aplicada (LEAA), Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, P59072-970, Natal, Brasil.
E-mail: josej.arroyog@gmail.com

Palabras Claves: carbón activado, supercapacitor, detector electroquímico.

Resumen

En este trabajo se sintetizó un carbón activado (CA) a partir de carozos de durazno (*Prunus persica*), utilizando $ZnCl_2$ y $ZnCl_2$:$FeCl_3$ (50:50) como agentes activantes. El precursor fue puesto en contacto con la solución activante, y posteriormente se procedió al tratamiento térmico, produciendo simultáneamente los pasos de carbonización y activación. Los materiales obtenidos fueron utilizados en ensayos electroquímicos para determinar su capacidad como acumuladores de carga (supercapacitores). El CA obtenido con cloruro de zinc se denominó CAZn y el otro se denominó CAZnFe.

Los carbones activados presentaron áreas superficiales de 750 m^2g^{-1} para CaZnFe y de 1000 m^2g^{-1} para el CAZn, con poros en el rango de los microporos (<2 nm) y mesoporos (2-50 nm). En ambos casos, el diámetro de poro fue inferior a 5 nm. El CAZn presentó una mayor microporosidad. El análisis térmico reveló una pérdida de peso en una etapa, observándose que el CAZnFe empezó a descomponerse ~100°C antes que el CAZn, llegando a una descomposición total para ambas entre 500 y 600 °C, indicando la presencia única de carbono en las muestras. Los resultados electroquímicos mostraron que los carbones activados presentaron el comportamiento típico de supercapacitores, con contribuciones a la capacitancia debido a efectos pseudocapacitivos por presencia de grupos oxigenados en la superficie del carbono. Además, se estudió la posibilidad de aplicar estos carbones como detectores electroquímicos, encontrándose que estos materiales son adecuados para esta aplicación.

P39

Estudio teórico de la adsorción de moléculas de hidrógeno sobre un nanotubo de carbono decorado con rutenio

Valeria Verdinelli [1*], Estefanía German[2], Alfredo Juan[2]

[1]*Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina.*
[2]*Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. Alem 1253, B8000CPB, Bahía Blanca, Argentina*
E mail: vverdinelli@uns.edu.ar

Palabras Claves: nanomateriales de carbono, almacenamiento de hidrógeno, rutenio, DFT.

Resumen

En la actualidad grandes esfuerzos se han centrado en la búsqueda y el desarrollo de nuevos materiales altamente capaces para almacenar hidrógeno de forma eficiente, segura y a un bajo costo. Varios investigadores están explorando una multitud de materiales basados en carbono debido a su peso ligero y alta estabilidad. Una forma de incrementar su eficiencia es mediante la adición de átomos de metales de transición (TM) a las estructuras de carbono. En el presente trabajo se estudia mediante cálculos a primeros principios la adsorción de hidrógeno sobre un nanotubo de capa simple (SWCNT) (8,0) funcionalizado con un átomo de Ru. Los resultados preliminares muestran una fuerte interacción entre el TM y el SWCNT debido a la transferencia de carga del Ru al nanotubo de carbono. De este modo, el átomo de Ru actúa como centro de adsorción para las moléculas de H_2 incrementando la energía de adsorción de -0.07 eV (H_2-CNT) a -0.70 eV (H_2-Ru/CNT). La adsorción de una molécula de H_2 resulta disociativa, donde el enlace H-H pasa de 0.75 a 2.35 Å. Consecutivas adsorciones de H_2 revelan que un Ru es capaz de adsorber hasta cuatro moléculas de H_2 con una energía de -0.93 eV/H_2.

P40

Estudio de las superficies por conformado de chapas de acero, correlación entre rugosidad y área real de contacto.

Patricia Benedetti*[1,3], Lucio Iurman[2], Daniel Ziegler[2], Mauro Puccinelli[2], Jorge Insausti[2], Alberto Lucaioli[2]

[1]Departamento de Física, [2]Departamento de Ingeniería - Universidad Nacional del Sur.[3]UTN – FRBB. Bahía Blanca. Argentina.
E-mail: pbenedet@criba.edu.ar

Palabras Claves: Estampado de chapas, Chapas de acero. Lubricantes, Fricción.

Resumen

En el trabajado industrial de metales es muy importante la característica superficial del material utilizado. Por eso en los procesos de conformado de chapas de acero que involucran fricción entre las superficies en contacto, los valles y picos de estas superficies que se ensayan se adaptan de tal manera que conforman un área de contacto que siempre es menor al área teórica, además el área real cambia con el tipo de ensayo y con la deformación a la que está sometida la pieza.

Las fuerzas de fricción que se desarrollan están determinadas por el coeficiente de rozamiento que impera en el sistema tribológico y éste se ve influenciado por la rugosidad inicial, la velocidad de deslizamiento, la fuerza normal entre superficies y el lubricante empleado.

En este trabajo se hicieron ensayos tipo Inland, variando el lubricante utilizado y el número de pasadas sobre la probeta, se estudió la correlación existente entre las variables mencionadas con el coeficiente de rozamiento, la rugosidad obtenida y el área real de contacto entre superficies, con el fin de predecir fenómenos de daño severo que pueden llegar al despegue de las soldaduras de asperezas que se producen por el calor de fricción, conocido como “galling”.

Área: Aspectos computacionales

P41

Estudio DFT de la reactividad de nanopartículas de Fe cerovalente y bimetálicas para la remoción de especies de arsénico

Leslie L. Alfonso Tobón, Walter G. Reimers, Silvia A. Fuente *, María M. Branda

IFISUR(CONICET), Universidad Nacional del Sur, Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.
E mail: sfuente@uns.edu.ar

Palabras Claves: Contaminantes, materiales adsorbentes, DFT, nanopartículas.

Resumen

La gran contaminación existente en las aguas subterráneas con especies de arsénico en importantes regiones de Argentina, ha conducido a investigar posibles caminos para su eliminación. En este trabajo se evaluó la interacción de ácido arsénico y arsenioso con las caras (111) y (110) y cuatro nanopartículas diferentes (Fe_{32}, Fe_{59}, Fe_{80} y Fe_{113}) considerando tanto Fe cerovalente como hidroxilado. También se estudió la adsorción del H_3AsO_3 intercambiando átomos de Fe por Pd. Los cálculos se realizaron con el código VASP utilizando la teoría del funcional de la densidad y el funcional de correlación e intercambio PBE. Los resultados mostraron que, al adsorberse el ácido arsénico (H_3AsO_4) en la cara (110) éste se reduce espontáneamente a ácido arsenioso. Luego se observó que la adsorción de H_3AsO_3 en las nanopartículas Fe_{32} y Fe_{59} y en la superficie (111) conduce a la descomposición espontánea del ácido. Al hidroxilar tanto las superficies como las nanopartículas se pudo observar como los ácidos son quimisorbidos en todos los sustratos evaluados, excepto en la superficie (110), debido a la disposición de los átomos en este plano. La sustitución de un átomo de Fe por Pd no ha mostrado cambios significativos en las energías de adsorción de H_3AsO_3.

P42

Formación de pequeños agregados de Cu, Ag y Au sobre la superficie de hematita (α-Fe_2O_3)

Silvia A. Fuente*[1], Carolina Zubieta[2], Patricia G. Belelli[1], Ricardo M. Ferullo[2]

[1]IFISUR (CONICET), Universidad Nacional del Sur, Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.
[2]INQUISUR (CONICET), Universidad Nacional del Sur, Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.
E-mail: sfuente@uns.edu.ar

Palabras Claves: Nucleación, DFT, hematita.

Resumen

Mediante un modelo químico cuántico se llevó a cabo un estudio comparativo de la adsorción de pequeños clusters M_n (M = Cu, Ag y Au, con n = 1-5) sobre hematita. El principal objetivo fue identificar los sitios de adsorción preferenciales y las geometrías de las partículas metálicas. Se empleó el programa VASP (Vienna Ab-Initio Simulation Package). Para materiales como la α-Fe_2O_3, se utiliza la aproximación denominada DFT + U. La energía de nucleación se definió como: $E_{nucl} = E(M_n/surf) - E(M_{n-1}/surf) - E(M_1)$, con n=2-5. Mientras que los átomos de Cu y Ag prefieren interactuar sobre sitios "hueco" de iones Fe, para Au el sitio más estable es sobre iones Fe superficiales. Las energías de adsorción para los átomos de Cu, Ag y Au fueron -2.31, -1.38 y -0.97 eV, respectivamente. Los cálculos evidencian que, para los tres metales, los dímeros y trímeros (triangulares) se adsorben inclinados con respecto a la superficie. Mientras que Au_4 adopta una estructura plana, Cu_4 y Ag_4 tienen forma tetraédrica. Para los pentámeros, los tres metales adoptan geometrías casi planares con todos los átomos M interactuando directamente con los iones superficiales. Los valores de E_{nucl} guardan una correlación con el spin de M_n adsorbido.

P43

Estudio DFT de la adsorción de SO_2 en CeO_2(111), CeO_2(331), ZnO(0001) y ZnO/ CeO_2(111)

Walter G. Reimers*[1], Zubieta Carolina[2], Ricardo M. Ferullo[2], Leslie L. Alfonso Tobón[1], María M. Branda[1]

[1]IFISUR,Universidad Nacional del Sur,Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.
[2]INQUISUR,Universidad Nacional del Sur,Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.
E mail: wreimers@criba.edu.ar

Palabras Claves: Óxidos, DFT, Catálisis.

Resumen

El dióxido de azufre, SO_2, ha sido uno de los mayores poluentes en todo el mundo. Actualmente, a pesar de las iniciativas gubernamentales orientadas al control de emisiones contaminantes,.siguen apareciendo episodios de contaminación ambiental por SO_2..Este trabajo está orientado a encontrar los mejores sustratos para la adsorción y eliminación del SO_2. Se han estudiado, utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT), los diferentes sitios de adsorción de la molécula de SO_2 sobre las superficies de CeO_2(111), CeO_2 (331) y ZnO(0001) perfectas y con vacancias de oxígeno. También se analizó la adsorción sobre una monocapa de ZnO soportada en ceria. Hemos hallado que las superficies más reactivas y adsorbentes son aquellas que presentan vacancias de oxígeno y la superficie con monocapa de ZnO. La superficie escalonada de ceria, cara (331), además de ser buen adsorbente, oxida a la molécula formando SO_3^{2-}.

P44

Determinación de las constantes de acoplamiento del modelo magnético de compuesto $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$ a partir de calculos de primeros principios

Matera J M [1,2], Lamas C. A[1,2], Gil Rebaza A[1,2,4], Fernandez V[1,2], Errico L[1,2,4]

[1]-Departamento de Ciencias Básicas, Facultado de Ingeniería, UNLP, 47 y 115, CP 1900, La Plata, Buenos Aires, Argentina.
[2]-IFLP-CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 49 y 115 s/n, CP 1900, La Plata, Buenos Aires, Argentina.
[3]-Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos, Dpto. de Electrotecnia, Fac. de Ingeniería, UNLP, 47 y 115, CP 1900, La Plata, Buenos Aires, Argentina.
[4]-Universidad Nacional del Noroeste de la Pcia. de Bueno Aires (UNNOBA), Monteagudo 2772, (2700) Pergamino, Argentina.
E-mail: arlesv@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: materiales magnéticos, fases cuánticas, sistemas de espines, simulación numérica.

Resumen

En este trabajo se analizará en forma crítica la estrategia standard para la estimación de las constantes de acoplamiento en modelos de Heisenberg obtenidas mediante simulaciones de estructura electrónica de primeros principios [1,2]. La técnica desarrollada se aplicará para la determinación de los parámetros del modelo de Heisenberg más adecuado para el sistema $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$ [3,4,5]. Este material ha despertado interés debido a su particular curva de magnetización, que sugiere que, en ausencia de campos magnéticos externos, presenta un estado fundamental desordenado. En base a los parámetros estimados se presentarán resultados de métodos semi-analíticos como campos medios generalizados y aproximaciones bosónicas para la descripción del diagrama de fases y estimar las correlaciones presentes en este sistema.

Referencias

[1] Louis Noodleman, The Journal of Chemical Physics 74, 5737 (1981).
[2] Klaus Capelle a, Vivaldo L. Campo Jr., Physics Reports 528 (2013) 91–159.
[3] Matsuda, M.; Azuma, M.; Tokunaga, M.; Shimakawa, Y. & Kumada, N. *Physical review letters, APS, (*2010), *105*, 187201.
[4] Smirnova, O.; Azuma, M.; Kumada, N.; Kusano, Y.; Matsuda, M.; Shimakawa, Y.; Takei, T.; Yonesaki, Y. & Kinomura, N., *Journal of the American Chemical Society, ACS Publications, (*2009), *131*, 8313-8317.
[5] Mojtaba Alaei, Hamid Mosadeq, Ismail Abdolhossaini Sarsari, and Farhad Shahbazi, cond-mat: 1702.05255 (2017).

P45

Adsorción y disociación de O_2 sobre nanopartículas de Au, Ag y Cu

G.S. Otero*, B. Pascucci, P.G. Belelli, M.M. Branda

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, IFISUR, CONICET, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina.
Email: guadalupe.otero@uns.edu.ar.

Palabras Claves: Oxígeno, disociación, nanopartículas, DFT

Resumen

En numerosas reacciones de oxidación, la adsorción disociativa de la molécula de oxígeno sobre un sustrato es la etapa determinante para que luego ocurra la reacción de interés, es decir, la reacción sólo ocurrirá una vez que el oxígeno este adsorbido en forma atómica [1-2]. Es el caso de la oxidación del monóxido de carbono sobre Au, Ag y Cu. Por ello se estudió la adsorción y disociación de la molécula de oxígeno sobre las nanopartículas de Me_{19}, Me_{38} y Me_{55}. (Me= Au, Ag y Cu)

A partir de los estudios realizados, fue posible hallar sitios donde ocurre la adsorción estable del oxígeno molecular y su disociación, siendo *bridge* en las aristas de las nanopartículas para la molécula de oxígeno y *hollow* para los átomos disociados. Además, se logró un orden de reactividad comparable con resultados experimentales [3] sobre oro y plata que reportan una secuencia Cu > Au ≥ Ag. Para este estudio en particular, fue necesario incluir cálculos no colineales donde se corrigen los errores asociados a efectos relativistas, [4] siendo especialmente importante para metales pesados, es decir metales con muchos electrones como es el caso del oro.

Referencias

[1] A. Wittstock et al., J. Phys. Chem. C, vol. 113, no. 14, pp. 5593–5600, 2009.
[2] Kim, J. Resasco, Y. Yu, A. M. Asiri, and P. Yang, Nat. Commun., vol. 5, no. May, p. 4948, 2014.
[3] Freyschlag, C. G., & Madix, R. J. (2011). Materials Today, 14(4), 134–142. https://doi.org/10.1016/S1369-7021(11)70085-2
[4] L. Xiao and L. Wang, Chem. Phys. Lett., vol. 392, no. 4–6, pp. 452–455, 2004.

P46

Estudio teórico DFT en óxidos mixtos: $CeZrO_2$ y Ni-$CeZrO_2$.

G.S. Otero*, G. Zimicz, M.M. Branda, F. Prado

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, IFISUR, CONICET, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina.
Email: guadalupe.otero@uns.edu.ar.

Palabras Claves: Óxidos mixtos, vacancias, Ni-$CeZrO_2$, DFT+U

Resumen

Las celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia (IT-SOFCs)[1] constituyen una alternativa en la búsqueda de energías limpias y más eficientes. Entre los distintos materiales propuestos para el ánodo de las IT-SOFC se encuentra el CeO_2 dopado con metales de transición para mejorar su capacidad catalítica [2]. En el presente trabajo se estudiaron, utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT+U), los compuestos de $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ y Ni-$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ en los límites de bajas concentraciones de Zr y Ni; hasta 10% y 2% respectivamente [2,3]. Se consideró una variedad de 10 configuraciones diferentes para hallar la distribución más estable en el bulk, de los átomos de Zr en el compuesto $CeZrO_2$ en dos composiciones: 6,25 y 9,4% de Zr. La configuración más estable es la que presenta mayor distancia promedio entre los átomos de Zr. El mismo análisis se realizó para hallar la distribución de Ni en el compuesto de Ni-$CeZrO_2$ y en las superficies extendidas (111) [4]. También se analizó la formación de vacancias de oxígeno en todos los casos, su influencia en la estructura electrónica y en los mecanismos involucrados para la oxidación parcial del metano.

Referencias

[1] R. O. Fuentes, L. M. Acuña, M. G. Zimicz, D. G. Lamas, J. G. Sacanell, A. G. Leyva, R. T. Baker. Chem. Mater. 2008, 20, 7356–7363
[2] X. Wang, M. Shen, J. Wang. J. Phys. Chem. C 2010, 114, 10221–10228
[3] M.G. Zimicz, F.D. Prado, D.G. Lamas, S.A. Larrondo. Applied Catalysis A, General 542 (2017) 296–305
[4] M.M. Branda, R.M. Ferullo, M. Causà, F. Illas. J. Phys. Chem. C 2011, 115, 3716-3721.

P47

Isotermas de absorción de H en nanocables de Pd

Eduardo Crespo[1,2*], Margarita Ruda[3], Susana Ramos[4,2], Eduardo Bringa[5,4], Fabián Braschi[2]

[1] *UTN-FRN, Avenida Rotter s/n 8321 Plaza Huincul Neuquén Argentina.*
[2] *FAIN UNCo, Bs As 1400 8300 Neuquén Argentina.*
[3] *CAB CENEA, Av. Exequiel Bustillo 9500, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro Argentina*
[4] *CONICET*
[5] *FCEN UNCUYO, Padre Jorge Contreras 1300, 5500 Mendoza Argentina*
E mail: *cresporama@gmail.com.*

Palabras Claves: Nanocables de Pd, dinámica molecular, isotermas de absorción de H.

Resumen

Los nanocables de Pd y su interacción con el H resultan de gran interés en aplicaciones nanotecnológicas como por ejemplo en detección de este elemento. Se trata de estructuras delgadas de Pd que pueden considerarse cuasi-unidimensionales puesto que dos de sus dimensiones resultan nanométricas. La interacción del H con los nanocables de Pd puede abordarse por medio de simulaciones atomísticas que permiten obtener resultados y compararlos con datos experimentales, pero además estas técnicas pueden brindar información no asequible por vía experimental [1]. En este trabajo se calculan isotermas de absorción de H de nanocables de Pd empleando técnicas de dinámica molecular LAMMPS[2] con potenciales de átomo embebido (EAM)[3] en un ensamble gran canónico (NPTμ) donde se mantienen constante el número de átomos de Pd, presión, temperatura, y potencial químico del H con un reservorio de gas, mientras que resultan variables el número de átomos de H, volumen, y la energía del sistema. Se analizan como afectan a las isotermas de absorción cambios en el diámetro y longitud del nanocable cuando la temperatura es de 300K. Se estudian efectos de segregación radial de H[4], al aumentar el potencial químico el nanocable de Pd primero se hidrura en su periferia y luego en su interior.

Referencias

[1] S Ramos, E.A. Crespo, F.U. Braschi, E.M. Bringa, M.L. Alí, M. Ruda. International Journal of Hydrogen Energy 39 (2014) 8590-8595
[2] Plimpton, S.J. LAMMPS (1995). Comp Phys, 117, 1-19.
[3] X. Zhou et al., J Mater Res 23, 704 (2008)
[4] E.A. Crespo, M. Ruda, S. Ramos, E.M. Bringa, F. U. Braschi, G. Bertolino. International Journal of Hydrogen Energy 37 (2012) 14831-14837.

P48

Red de Kondo unidimensional con interacciones: puntos de Toulouse y mapeo a un modelo múltiplemente resonante mediante refermionización

Tomás Bortolin[1], Alejandro Lobos[2], Anibal Iucci[1*]

[1] Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata, cc 67 1900 La Plata, Argentina.
[2] Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, 5500, Mendoza, Argentina
Email.iucci@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: : red de Kondo, bosonización.

Resumen

Estudiamos un sistema electrónico unidimensional interactuante acoplado a una red de impurezas de Kondo. Mostramos que el Hamiltoniano puede ser refermionizado en un punto de Toulouse y escribirse como un sistema multiresonante.

P49

Red de Kondo-Shiba en un superconductor unidimensional

Tomás S. Bortolin[1,2]*, Aníbal Iucci[1,2], Alejandro M. Lobos[3]

[1] *Instituto de Física La Plata, CONICET*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Cuyo*
E mail: bortolin@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: Sistemas fuertemente correlacionados, Superconductividad, Aislantes Topológicos, Bosonización

Resumen

Se considera una red de impurezas cuánticas de spin 1/2 acopladas mediante interacciones de Kondo a un nanohilo superconductor. Los grados de libertad electrónicos del nanohilo se estudian utilizando las técnicas de bosonización. El Hamiltoniano muestra una estructura interesante: el término superconductor presenta un gap que cambia de signo al pasar por el sitio de una impureza, lo que da lugar a un modo de energía cero localizado, conocido como solitón de Jackiw-Rebbi.

Referencias

[1] V. J. Emery, S. Kivelson, Physical Review B 46, 10812 (1992).
[2] O. Zachar, S. A. Kivelson, V. J. Emery, Physical Review Letters 77, 205104 (1996).
[3] Braunecker, B., P. Simon, Physical Review Letters 111, 147202 (2013)

P50

Estabilidad de intermediarios de la reacción de WGS sobre Pr-CeO

Agustín Salcedo, Beatriz Irigoyen*

Instituto de Tecnologías del Hidrógeno y Energías Sostenibles (ITHES), CONICET - Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Pabellón de Industrias, Ciudad Universitaria, 1428, Buenos Aires, Argentina.
E mail: beatriz@di.fcen.uba.ar

Palabras Claves: DFT, WGS, CeO_2, praseodimio

Resumen

En este trabajo estudiamos la estabilidad de intermediarios correspondientes a los principales mecanismos propuestos para la reacción de WGS: redox [1-3] y formiato [4-6]. Se realizaron cálculos DFT+U con el programa VASP [7,8]. Se modeló la superficie Pr-CeO_2(111) empleando un slab p(3x3) de 9 capas, reemplazando un catión Ce por Pr (3,7 % at/at).

Previamente [9] mostramos que los estados 4f del catión Pr_{4+} son energéticamente más accesibles que los de Ce^{4+}, favoreciendo procesos de reducción. Sin embargo, este efecto promotor desaparece cuando el dopante se reduce a Pr^{3+}, ya que sus estados desocupados restantes se desplazan a energías mayores. Entonces, se evaluaron una superficie estequiométrica donde el dopante se encuentra en su estado Pr^{4+}, y una donde el dopante es reducido a Pr^{3+} por formación de una vacancia de oxígeno. Los intermediarios considerados fueron el formiato ($CHOO^-$) y el CO_2 formado por oxidación de CO con oxígeno superficial, donde el agua permanece adsorbida sobre un catión.

En la superficie reducida ambos sistemas presentaron similar energía, sugiriendo posible competencia entre los mecanismos. En cambio, en la superficie estequiométrica la formación de CO_2 se vio fuertemente favorecida, ya que se trata de un proceso de reducción promovido por Pr^{4+}.

Referencias

[1] T. Bunluesin, R.J. Gorte, G.W. Graham, Appl. Catal. B Environ. 15 (1998) 107–114.
[2] R.J. Gorte, S. Zhao, Catal. Today 104 (2005) 18–24.
[3] C.M. Kalamaras, S. Americanou, A.M. Efstathiou, J. Catal. 279 (2011) 287–300.
[4] T. Shido, Y. Iwasawa, J. Catal. 141 (1993) 71–81.
[5] G. Jacobs, L. Williams, U. Graham, G.A. Thomas, D.E. Sparks, B.H. Davis, Appl. Catal. A Gen. 252 (2003) 107–118.
[6] E. Chenu, G. Jacobs, A.C. Crawford, R.A. Keogh, P.M. Patterson, D.E. Sparks, B.H. Davis, Appl. Catal. B Environ. 59 (2005) 45–56.
[7] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B 47 (1993) 558.
[8] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B 49 (1994) 14251.
[9] B. Milberg, A. Juan, B. Irigoyen, Appl. Surf. Sci. 401 (2017) 206–217

P51

Caracterización de óxido de circonio monoclínico para PEMFC

Gómez Maximiliano*, Llamas Rossi Soledad, López María Beatriz

Centro de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, (CIFTA), Universidad Nacional de Catamarca, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Av. Belgrano 300, 4700, Catamarca, Argentina.
E mail: maxigomez.mg@gmail.com

Palabras Claves: óxido de circonio, celda de combustible, DFT

Resumen

En la economía del hidrógeno, la aplicación práctica a gran escala de celdas de combustible de bajas temperaturas tipo PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cells) sólo es posible logrando una importante reducción de los costos. Para ello es necesario un diseño racional de nuevos materiales, a partir de mejorar significativamente las propiedades de los electrodos electrocatalíticos.

En este trabajo se presenta un estudio, basado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), del óxido de circonio optimizado con el método B3PW91, la base 6-31G* para los átomos de oxígeno y el pseudopotencial LANL2DZ para los átomos de circonio, según el formalismo del programa Gaussian09. El interés de este estudio se centra en encontrar nuevas estructuras catalíticas para celdas de combustible a bajas temperaturas libres de platino.

El análisis de las propiedades catalíticas, permitió correlacionar la mayor reactividad con los efectos geométricos, electrónicos y el tamaño del catalizador. Esto evidencia que es posible mejorar su funcionalidad, modificando su estructura electrónica a través de cambios en su geometría.

P52

Estudio estructural de la superficie $ZnFe_2O_4$ (001) usando cálculos ab-inito

Karen L. Salcedo Rodríguez[1], Jhon J. Melo Quintero[1], Arles V. Gil Rebaza[1,2], Claudia E. Rodríguez Torres[1], Ricardo Faccio[3], Leonardo. A. Errico[1,4]

[1]IFLP y Departamento Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de la Plata-CCT La Plata CONICET, C.C. 67, CP 1900, La Plata, Argentina.
[2]Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos, Dpto. de Electrotecnia, Fac. de Ingeniería, UNLP
[3]Centro NanoMat-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.
[4]Universidad Nacional del Noroeste de la Provincia de Buenos Aires – UNNOBA, Monteagudo 2772, Pergamino, CP 2700, Buenos Aires, Argentina.
E-mail: klsalcedor@fisica.unlp.edu.ar

Palabras Claves: $ZnFe_2O_4$, DFT, superficie.

Resumen

Las ferritas presentan muy variadas propiedades electrónicas y magnéticas. Defectos estructurales (inversión, vacancias de oxígeno) y efectos de tamaño/superficie juegan un rol muy importante en el origen y modificación de dichas propiedades [1-2]. La ferrita de Zn ($ZnFe_2O_4$, ZFO) es paramagnética a temperatura ambiente y presenta frustración y comportamiento tipo vidrio de espín a T<10 K.

Cuando las dimensiones se reducen (nanopartículas ó películas delgadas), ZFO presenta comportamiento ferrimagnético a temperatura ambiente, asociado a la presencia de inversión catiónica en la superficie, volviéndose atractiva por su potencial aplicación en dispositivos semiconductores magnéticos transparentes [3]. En este trabajo presentamos un estudio de la estructura de equilibrio de la superficie (001) de ZFO y los cambios en la estructura magnética debidos a la inversión catiónica mediante cálculo de primeros principios basado en la Teoría de la funcional Densidad (DFT) y del método FP-LAPW implementado en el código Wien2k [4]. Diferentes configuraciones atómicas superficiales fueron exploradas, identificando el ordenamiento más estable. Se estudió además el costo energético de la inversión catiónica a diferentes profundidades de la superficie, y se comparó también con cálculos realizados sobre el sistema volumétrico. Los resultados obtenidos, se encuentran en buen acuerdo con los resultados reportados en la literatura.

P53

Efectos del solvente en la oxidación de CO sobre una lámina de β-grafino. Estudio teórico

Yesica Celeste Villagrán López*, María Beatriz López

Centro de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (CIFTA), Universidad Nacional de Catamarca, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Maximio Victoria N°55, CP 4700, San Fernando del Valle de Catamarca, Argentina.
E mail: celestevillagranlopez@gmail.com

Palabras Claves: β-grafino, teoría del funcional de la densidad, adsorción y oxidación de CO.

Resumen

Debido a la fuerte adsorción de CO sobre la superficie de catalizadores basados en Platino, lo que constituye un inconveniente en el desarrollo y posterior funcionamiento de celdas de combustible, a causa de la rápida perdida de actividad que provoca un descenso en la actividad catalítica. Se propone como solución, el estudio de sistemas libres en Platino y con mayor tolerancia a CO.

En este trabajo se presenta un estudio, basado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), de la adsorción y oxidación de CO sobre un catalizador libre de platino constituido por una lámina de grafino, como potencial catalizador de celdas de combustible. Se estudiaron propiedades estructurales, energéticas, electrónicas y reactividad química de una lámina de β-grafino en presencia de CO, al vacio y en medio acuoso, se realizó un análisis comparativo de ambos procedimientos. Se propone una ruta de reacción, mediante el mecanismo Eley-Rideal. Los cálculos fueron realizados usando el funcional B3PW91 y la base 6-31 G para optimizar el sistema, el estado de transición se obtuvo mediante el método QST2, se calcularon coordenadas de reacción intrínsecas (IRC) para obtener el mecanismo de reacción. Los cálculos se realizaron según el formalismo del programa Gaussian 09.

P54

Caracterización Estructural, Electrónica y Reactividad Química de la Nanoaleación Binaria Pt-Ir

Córdoba Daniel, Graciela Beatriz Díaz, María Beatriz

Centro de investigaciones fisicoquímicas teóricas y aplicadas (CIFTA), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad nacional de Catamarca, C.P.: 4700, Catamarca, Argentina.
E mail: daniel-cr@outlook.com

Palabras Claves: Celda de combustible, PtIr clúster bimetálico, Cálculos DFT, adsorción CO

Resumen

En el presente trabajo se presenta un estudio teórico de las nanoaleaciones binarias PtnXm (X=Ir, n+m=6), como una alternativa al platino puro, de uso común como electrocatalizador en las celdas de combustibles de membrana de intercambio de protones.

Hemos utilizados cálculos en base a la teoría del funcional de la densidad bajo el formalismo del programa gaussian 09, donde la composición y la geometría del clúster puede ser controlado mediante el ajuste del nivel de interacción entre el clúster y el metal dopante, así como entre la molécula de adsorbato y el clúster, permitiendo ajustar las propiedades del material átomo por átomo y utilizarse en el diseño de nuevos materiales catalíticos eficientes.

Los resultados se analizan en términos de un análisis vibracional, principios de reactividad como polarizabilidad mínima y máxima dureza y energías de adsorción de CO.

Encontramos que cuanto más estable es el sistema menos polarizable y más dura es la nanoaleación, esto demuestra que los principios de mínima polarizabilidad y máxima dureza son adecuados para la caracterización de estos sistemas. En cuanto a la composición y el efecto del soporte promueve una mayor tolerancia al CO que los sistemas libres, debido a que se provoca una modificación en las propiedades electrónicas de los catalizadores.

P55

Estudio DFT de $KMnO_2$ con impurezas

Julián Juan[1], Victoria Gallegos[3], Romina Luna[1,2], Pablo Bechthold[1,2], Estela González[1,2], Valeria Orazi[2,4], Jorge Sambeth[3], Paula Jasen[1,2*]

[1]*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina*
[2]*Instituto de Física del Sur (IFUSUR), UNS-CONICET, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina*
[3]Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA), Fac. Cs. Ex. UNLP-CONICET, 47 Nro. 257,1900, La Plata, Argentina
[4] *Departamento de Ingeniería Electrónica y Computadoras, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina*
E mail: pjasen@uns.edu.ar

Palabras Claves: Hollandita, DFT, Defectos, Magnetismo

Resumen

La hollandita ($KMnO_2$) posee propiedades catalíticas en la oxidación de compuestos orgánicos volátiles, en baterías y propiedades magnéticas de utilidad en espintrónica. [1-3]. Se realizaron cálculos DFT espín polarizados para determinar los cambios en las propiedades físicas y químicas del $KMnO_2$ puro y con impurezas, usando VASP [4]. La estructura cristalina consiste de octaedros MnO_6 que comparten corners y bordes con canales entre ellos. La presencia de K^+ en dichos canales le proveen estabilidad por sobre la fase rutilo. Los cálculos se realizaron con pseudopotenciales PAW y la aproximación GGA se usó con la parametrización PBEsol. Se consideró la corrección de Hubbard para una correcta descripción del sistema. Los resultados muestran que de las dos posibles estructuras (monoclínica y tetragonal) la más estable es la monoclínica lo que está de acuerdo con los resultados experimentales. En este caso particular, la formación de $KMnO_2$ se realiza por recuperación de pilas, de este modo se consideró como impurezas iones Zn. Si bien los defectos se los consideró con cargas K^{+1} y Zn^{+2}, se trató de cargas locales balanceadas desde la matriz del óxido. La estructura electrónica se analizó mediante proyecciones DOS y el enlace químico mediante la técnica COOP.

Referencias

[1] E. Cokayne, L. Li; Chem. Phys. Lett. 544 (2012) 53-58.
[2] F. Wyrwalski, J.F. Lamonier, S. Siffert, A. Aboukaïs; Appl. Catal. B 70 (2007) 393-399.
[3] A. Benmakhlouf, A. Bentabet, A. Bouhemadou, S. Maabed, A. Benghia, R. Khenata, S. Bin-Omran; J. Mag. Mag. Mat. 408 (2016) 199-205
[4] https://www.vasp.at/.

P56

Efectos de tamaño y forma sobre el comportamiento de nanopartículas ferroeléctricas.

Franco Di Rino, Marcelo Sepliarsky* y Marcelo Stachiotti

IFIR, Conicet - Universidad Nacional de Rosario, Ocampo y Esmeralda, 2000 Rosario, Argentina
E-mail: sepliarsky@ifir-onicet.gov.ar

Palabras Claves: ferroeléctricos, nanopartículas, modelos.

Resumen

En el presente trabajo aplicamos una descripción atomística para investigar las influencias del tamaño y de la forma en el comportamiento polar de nanopartículas de $PbTiO_3$. El estudio se llevó a cabo mediante simulaciones de dinámica molecular en nanopartículas aisladas de diferentes tamaños y con formas cilíndricas, esféricas y elipsoidales. Como consecuencia de las condiciones de contorno impuestas, las nanopartículas no poseen una polarización neta resultante. Sin embargo, la distribución de los dipolos locales da lugar a una rica variedad de estructuras polares. En los cilindros más pequeños la primera configuración con orden polar observada corresponde al estado de un vórtice donde las polarizaciones locales rotan continuamente alrededor del eje de cilindro. Dicho estado evoluciona hacia un estado de dominios ferroeléctricos de flujo cerrado al aumentar el tamaño. El cambio en la relación de aspecto espesor/diámetro de los cilindros da lugar a una sucesión de transformaciones topológicas que incluyen múltiples vórtices, estado de burbuja ferroeléctrica y múltiples dominios. En el caso de las esferas solo se observan estados de un único vórtice y dominios ferroeléctricos de flujo cerrado. Finalmente, el comportamiento de los elipsoides es más complejo, destacándose la ausencia de una burbuja ferroeléctrica.

P57

Justificación teórica de la determinación del coeficiente de Hubbard para la representación de la titania

Cecilia I. N. Morgade[1,2] *; Gabriela F. Cabeza[1]

[1]*Departamento de Física, Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, CONICET, Universidad Nacional del Sur, Av Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad Regional Bahía Blanca, Universidad Tecnológica Nacional*
11 de abril 461, 8000, Bahía Blanca, Argentina.
E mail: cmorgade@uns.edu.ar

Palabras Claves: titania – DFT+U – estructura electrónica

Resumen

La descripción correcta de las propiedades electrónicas de óxidos de metales de transición es una deficiencia bien conocida de la Teoría del Funcional Densidad (DFT), que particularmente subestima el ancho de la banda prohibida (BG). Un enfoque viable para resolver los errores de auto-interacción para materiales de electrones fuertemente correlacionados es el uso del formalismo DFT + U [1] que ha demostrado su capacidad para corregir esta deficiencia. En este trabajo se presenta un estudio detallado de la elección del mejor parámetro de Hubbard que representa correctamente las estructuras electrónicas de los dos polimorfos más abundantes y activos de la titania (TiO_2) como son la anatasa y el rutilo. El valor de U se varió de 0 a 10 eV para cada potencial de correlación e intercambio utilizando la aproximación de Dudarev [2] implementada en el VASP [3]. Un valor de U= 8 eV representa correctamente la estructura electrónica de ambos polimorfos anatasa y rutilo [4].

Referencias

[1] V. Anisimovy, F. Aryasetiawanz, A. I. Lichtensteinx, J. Phys. Condens. Matter. 9 (1997) 767.
[2] S. Dudarev, G. Botton, S. Savrasov, C. Humphreys, A. Sutton, Phys. Rev. B 57 (1998) 1505.
[3] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54 (1996) 11169.
[4] C. I. N. Morgade, tesis doctoral "Estudio de las propiedades del TiO_2 modificado como soporte de reacciones catalíticas ", UNS (2015).

Índice por Autor

Abbate 12
Albanesi 37, 38
Albornoz 43
Ale Crivillero 28
Alfonso Tobón 69, 71
Aligia 31, 39
Amigó 46
Aprea 54
Arce 37
Arlego 42
Arroyo Gómez 66
Baranova 11
Bechthold 83
Belelli 70, 73
Benedetti 68
Bercoff 40, 54
Betancourth 45
Bortolin 76, 77
Branda 69, 71, 73, 74
Braschi 75
Bravo 44
Bringa 75
Brizuela 52, 53
Butera 20
Cabeza 51, 56, 59, 86
Cabra 44
Cadenas 60
Cantero 61
Caram 37
Cardillo 41, 60
Caroca Canales 45
Castellani 29, 30
Castro 39
Chasvin Orradre 65
Colin 39
Colizzi 55
Córdoba 82
Cornaglia 45
Correa 22, 34, 45
Crespo 75
Di Loreto 58
di Prátula 41, 60
Di Rino 85
Díaz 82
Díaz Compañy 52

Diez 65
Domancich 29, 30
Encina 45
Errico 47, 57, 72, 80
Faccio 8, 63, 80
Fernández J. 31
Fernandez V 72
Ferrari 18
Ferreyra 43
Ferullo 70, 71
Fevrier 39
Foa Torres 1
Frattini 58
Frechero 16, 41, 60
Fuente 69, 70
Fuertes 62
Fuhr 61
García D. 45
García E. 32
Gay 39
Gebauer 6
Geibel 45
German 63, 64, 67
Gil Rebaza 57, 72, 80
Giuliani 60
Goijman 43
Goldberg 32
Gómez Albarracín 44
Gómez M 79
González 84
Granja 43, 62
Grizzi 61
Guimpel 25, 60
Haberkorn 34,46
Hernandez 41, 60
Hoffmann 2
Huamán Gutierrez 36
Iglesias-García 32
Insausti 68
Irigoyen 78
Iucci 76, 77
Iurman 68
Jasen 84
Jeanneau 39
Jiménez 51
Johánek 65
Johnston 55
Juan A. 52, 53, 67

Juan J. 83
Kohanoff 55
Koval 55
Lacroix 39
Lamas 3, 42, 72
Lasave 55
Levy 62
Leyva 43
Linares Moreau 43, 62
Llamas 79
Lobos 23,76,77
López María B. 79, 81
López Mir 62
Lucaioli 68
Luna 83
Lustemberg 27
Machado 58
Maiorov 45
Maldonado 56
Mangussi 35
Martiarena 61
Martínez Eduardo 62
Martinez Huitle 66
Martínez Emanuel 61
Matera 72
Meier 29, 30
Melo Quintero 80
Menchón 55
Mendoza Zelis 48
Meneses 40, 54
Mezio 24
Migoni 55
Mombrú 63
Montón 60
Moreau 43
Morgade 59, 86
Moro-Lagares 31
Mudarra Navarro 47
Nassif 39
Navarro 37
Nieva 46
Nomura 47
Núñez-Regueiro 39
Ocal 62
Orazi 84
Otero 73, 74
Pascucci 73
Pasquevich 48

Passanante 43
Passeggi 13
Pedrazzini 45
Peltzer 57
Pérez de Heluani 15
Pérez P. 46
Petrilli 4
Pistonesi 64, 65
Prado 74
Pronsato 64, 65
Puccinelli 68
Quintero 43
Ralko 39
Ramos 19, 55, 75
Reimers 69, 71
Remenyi 39
Riva 40, 54
Rodríguez Torres 21, 47, 48, 80
Román 53
Romero 32
Rossi 79
Rossi Fernández 29, 30
Rossini 44
Roura-Bas 31
Rozenberg 33
Rubi 43
Ruda 75
Rudolph 9
Salas Colera 39
Salcedo 78
Salcedo Rodríguez 48, 80
Sambeth 84
Sánchez 61
Santander-Syro 33
Sapag 5, 66
Sarmiento Chavez 60
Sepliarsky 58
Sereni 45
Serquis 7
Serrate 31
Simonetti 52, 53
Sola 41, 60
Soler-Illia 62
Solis 61
Stachiotti 58, 85
Stewart 48
Suard 39
Suárez 34, 46

Sulpice 39
Terny 41, 60
Torresi 55
Toulemonde 39
Turner 10
Urdaniz 39
Urreta 40
Usaj 35, 36
Vega 43
Verdinelli 64, 67
Villagrán Asiares 45
Villagrán López 81
Villarroel 66
Violi 62
Volpe 65
Weht 26, 33, 39
Zandalazini 17, 38
Zapata 34
Ziegler 68
Zimicz 74
Zubieta 70, 71