

## 23 de noviembre de 2017

Panel	TITULO	AUTORES
1	Especies de dopamina adsorbidas sobre Ag: estudio teórico	L. Meier, A. Rossi Fernández, N. Domancich, N. Castellani
2	Estudio teórico de la adsorción de dopamina-zwitterion sobre grupos epoxi de óxido de grafeno	A.C. Rossi Fernández, L.A. Meier, N.F. Domacich, N. J. Castellani
3	Dependencia de la temperatura de Kondo de átomos de Co sobre Ag(111) con la densidad de estados de superficie	M. Moro-Lagares, J. Fernández, P. Roura-Bas, A.A. Alglia, D. Serrate
4	Interacción de adsorbatos alcalinos con una superficie de grafeno	E.A. García, A. Iglesias-García, M. Romero, E. Goldberg
5	Magnetorresistencia extrema en los semimetales WTe <sub>2</sub> y PtBi <sub>2</sub>	V.F. Correa, N. Zapata, N. Haberkorn
6	Modelo tight-binding minimal para redes polaritónicas bidimensionales	F. Mangussi, G. Usaj
7	Propiedades Topológicas de Monocapas de Dicalcogenuros de Metales de Transición Irradiados con Luz Láser	A.M. Huamán Gutiérrez , G. Usaj
8	Determinación del band gap óptico en celdas solares híbridas orgánico-inorgánico: un estudio teórico experimental	J.L. Navarro, J.P. Caram, E.A. Albanesi, R.Arce
9	Magnetismo en sulfuro de estaño dopado con aluminio	C.I. Zandalazini, E.A. Albanesi
10	Orden orbital singlete en Sr <sub>2</sub> Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (de dos capas CrO <sub>2</sub> )	J. Jeanneau, P. Toulemonde, G. Remenyi, A. Sulpice, C. Colin, V. Nassif, E. Suard, E. Salas Colera, G. R. Castro, F. Gay, C. Urduzán, R. Weht, et al
11	Nanoestructuras de níquel con acople magnético determinado por la morfología	F. Meneses, J. S. Riva, S.E. Urreta, P.G. Bercoff
12	Síntesis de materiales magnéticos blandos para su aplicación en aerogeneradores	P. di Prátula, L.A. Hernandez, S. Torny, E.C. Cardillo, M.E. Sola, M.A. Frechero
13	Fases cuánticas y degeneración clásica en un antiferromagneto cuántico sobre la red de panal de abejas de dos capas	C.A. Lamas, M. Arlego
14	Estudio del efecto magnetocalórico en films delgados de La <sub>0,88</sub> Sr <sub>0,12</sub> MnO <sub>3</sub>	S. Passanante, D. Gojman, M. Linares Moreau, G. Leyva, C. Albornoz, D. Rubi, C. Ferreyra, D. Vega, M. Quintero, L. Granja
15	Interacciones de largo alcance en cadenas de spin antiferromagnéticas	B. Bravo, D.C. Cabra, F.A. Gómez Albarracín, G.L. Rossini
16	Dinámica de vórtices en monocristales de beta-FeSe, efectos de irradiación con protones y de pequeñas tensiones inhomogéneas	M.L. Amigó, N. Haberkorn, P. Pérez, S. Suárez, G. Nieva
17	Estudio mediante cálculos de primeros principios de las propiedades magnéticas e hiperfinas de SnO <sub>2</sub> co-dopado con Fe y Co	A.M. Mudarra Navarro, K. Nomura, L. Errico, C.E. Rodríguez Torres
18	Efecto de la modificación de la estructura local sobre las propiedades magnéticas de ferrita de Zn policristalina	K.L. Salcedo Rodríguez, S.J. Stewart, G. Pasquevich, P. Mendoza Zelis, C.E. Rodríguez Torres
19	Estudio de las nanopartículas core-shell Fe/Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> : cálculos ab-initio y técnicas experimentales	A.M. Mudarra Navarro, G.A. Muñoz Medina, A.V. Gil Rebaza, L. Errico, M. Fernández van Rapp, F. Sánchez
20	Estudio teórico de la aleación FeRh	M.J. Jiménez, G. Cabeza
21	Efecto de la modificación superficial de la sílica en la sorción de 4-formilaminoantipirina: estudio DFT	A. Díaz Compañy, G. Brizuela, A. Juan, S. Simonetti
22	Estudio DFT comparativo de la absorción de 5- fluorouracilo sobre carbón activado puro y dopado con aluminio	G. Román, G. Brizuela, A. Juan, S. Simonetti
23	Mecanismos de nucleación y crecimiento en películas de Fe sintetizadas por electroquímica sobre distintos sustratos de Al	M.S. Aprea, F. Meneses, J.S. Riva, P.G. Bercoff
24	Cálculo DFT del espectro fonónico y propiedades asociadas en KH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> (KDP)	R.E. Menchón, G. Colizzi, C. Johnston, F. Torresi, J. Lasave, S. Koval, J. Kohanoff, R. Migoni
25	Estudio de las propiedades físicas de clusters de Pt en su transición hacia el sólido	A.S. Maldonado, G.F. Cabeza, S.B. Ramos
26	Cálculo de la estructura electrónica y fonones para el estudio de los half-metallic d0 UN, NaN y KN: influencia del intercambio-correlación	A.V. Gil Rebaza, L. Errico, E.L. Peltzer y Blancá
27	Transiciones de fase y propiedades dieléctricas y ferroeléctricas del BaTiO <sub>3</sub> dopado con Mg	R. Machado, A. Di Loreto, A. Frattini, M. Sepiarsky, M. G. Stachiotti
28	Reactividad y distorsión cristalina de la titanía dopada con N y C	C.I.N. Morgade, G.F. Cabeza
29	Estudio DFT del MgH <sub>2</sub> dopado con Nb	F. Gaztañaga, R. Luna, M. Sandoval, A. Juan, G. Brizuela, P. Jansen

## 24 de noviembre de 2017

Panel	TITULO	AUTORES
1	Nuevos materiales conductores iónicos híbridos con aplicación como electrolitos sólidos	E. Cardillo, S. Torny, L. Hernandez, P. di Prátula, M.E. Sola, M.A. Frechero
2	Películas de germaneno en Au(111) y Al(111)	E. Martínez, L.M. Solís, E.D. Cantero, J.D. Fuhr, M.L. Martiarena, O. Grizzi, E.A. Sánchez
3	Propiedades eléctricas locales de films mesoporosos de TiO <sub>2</sub> infiltrados con nanopartículas de Au	M. Linares Moreau, L.P. Granja, E. Martínez, I. Violi, M.C. Fuertes, L. López Mir, C. Ocal, P. Levy, G.J.A.A. Soler-Ilia
4	Adsorción de catechol sobre superficies de TiO <sub>2</sub> -B(001), (100) y H <sub>2</sub> Ti <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (100) para aplicaciones en DSSCs	E. German, R. Faccio, A. Momburú
5	Modelado de catalizadores de clusters de Pd en su transición hacia el sólido	E. German, V. Verdinielli, C. Pistonesi, M.E. Proncato
6	Estudio teórico y experimental de adsorción y disociación de etanol sobre superficies de β-Mo <sub>2</sub> C dopada con Platino	M.N. Chasvin Orradre, A. Diez, E. Proncato, V. Johánek, M.A. Volpe, C. Pistonesi
7	Carbón activado a partir de biomasa para aplicaciones electroquímicas	J.J. Arroyo Gómez, D. Villarreal Rocha, C. Martínez Huitle, K. Sapag
8	Estudio teórico de la adsorción de moléculas de hidrógeno sobre un nanotubo de carbono decorado con Rutenio	V. Verdinielli, E. German, A. Juan
9	Estudio de las superficies por conformado de chapas de acero, correlación entre rugosidad y área real de contacto	P. Benedetti, L. Iurman, D. Ziegler, M. Puccinelli, J. Insausti, A. Lucaioli
10	Estudio DFT de la reactividad de nanopartículas de Fe cerovalente y bimetalicas para la remoción de especies de arsénico	L.L. Alfonso Tobón, W.G. Reimers, S.A. Fuente, M.M. Branda
11	Formación de pequeños agregados de Cu, Ag y Au sobre la superficie de hematita (α-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	S.A. Fuente, C. Zubieta, P.G. Belelli, R.M. Ferullo
12	Estudio DFT de la adsorción de SO <sub>2</sub> en CeO <sub>2</sub> (111), CeO <sub>2</sub> (331), ZnO(0001) y ZnO/CeO <sub>2</sub> (111)	W.G. Reimers, C. Zubieta, R.M. Ferullo, L.L. Alfonso Tobón, M.M. Branda
13	Determinación de las constantes de acoplamiento del modelo magnético de compuesto B <sub>3</sub> Mn <sub>2</sub> O <sub>12</sub> (NO <sub>3</sub> ) a partir de cálculos de primeros principios	J.M. Matera, C.A. Lamas, A. Gil Rebaza, V. Fernández, L. Errico
14	Adsorción y disociación de O <sub>2</sub> sobre nanopartículas de Au, Ag y Cu	G.S. Otero, B. Pascucci, P.G. Belelli, M.M. Branda
15	Estudio teórico DFT en óxidos mixtos: CeZrO <sub>2</sub> y Ni-CeZrO <sub>2</sub>	G. S. Otero, G. Zimic, M.M. Branda, F. Prado
16	Isotermas de absorción de H en nanocables de Pd	E. Crespo, M. Ruda, S. Ramos, E. Bringa, F. Braschi
17	Red de Kondo unidimensional con interacciones: puntos de Toulouse y mapeo a un modelo múltiple resonante mediante refermionización	T. Bortolin, A. Lobos, A. Iucci
18	Red de Kondo-Shiba en un superconductor unidimensional	T.S. Bortolin, A. Iucci, A.M. Lobos
19	Estabilidad de intermediarios de la reacción de WGS sobre Pr-CeO <sub>2</sub>	A. Salcedo, B. Irigoyen
20	Caracterización de óxido de circonio monoclinico para PEMFC	M. Gómez, S. Llamas Rossi, M.B. López
21	Estudio estructural de la superficie ZnFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (001) usando cálculos ab-initio	K.L. Salcedo Rodríguez, J.J. Melo Quintero, A.V. Gil Rebaza, C.E. Rodríguez Torres, R. Faccio, L.A. Errico
22	Efectos del solvente en la oxidación de CO sobre una lámina de β-grafino. Estudio teórico	Y.Celeste Villagrán López, M.B. López
23	Caracterización estructural, electrónica y reactividad química de la nanoaleación binaria Pt-Ir	D. Córdoba, G.B. Díaz, M.B. Lopez
24	Estudio DFT de KMnO <sub>2</sub> con impurezas	J. Juan, V. Gallegos, R. Luna, P. Bechthold, E. González, V. Orazi, J. Sambeth, P. Jansen
25	Efectos de tamaño y forma sobre el comportamiento de nanopartículas ferroeléctricas	F. Di Rino, M. Sepiarsky, M. Stachiotti
26	Justificación teórica de la determinación del coeficiente de Hubbard para la representación de la titanía	C.I.N. Morgade, G.F. Cabeza