

XVII Taller Regional de Física Estadística y
Aplicaciones a la Materia Condensada

TREFEMAC 2019



24 al 26 de abril de 2019
San Luis - Argentina

Auspiciantes



DEPARTAMENTO DE FÍSICA
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
Universidad Nacional de San Luis



Centro Científico Tecnológico San Luis

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas



Agencia Nacional de Promoción
Científica y Tecnológica



Instituto de
Física Aplicada

Comité Organizador

Dr. Antonio J. Ramirez Pastor
Dr. Fernando Bulnes
Dr. Raúl López
Dr. Marcelo Pasinetti
Dra. Valeria Cornette
Dr. Rolando Belardinelli
Dr. Paulo Marcelo Centres
Dr. Rodolfo Porasso
Dra. Jessica Benito
Mg. Julio Sirur Flores
Dr. Fabricio Sánchez-Varretti
Dr. Claudio Narambuena
Lic. Lucía Soledad Ramírez
Lic. Camila Villagrán
Lic. Julián José Riccardo
Lic. Rodrigo Delgado Mons
Lic. Juan Ignacio López Ortiz
Tec. Marcela Corallo
Prof. Adriana Gallard
Esp. Santiago Calzetti
Lic. Julio César Ochoa Saldaña

Comité Científico

Celso Manuel Aldao – Universidad Nacional de Mar del Plata
Sergio Alejandro Cannas – Universidad Nacional de Córdoba
Mario Campo – Universidad Nacional de La Pampa
Carlos A. Condat – Universidad Nacional de Córdoba
Marisa Alejandra Frechero – Universidad Nacional del Sur
Tomás Sebastián Grigera – Universidad Nacional de La Plata
Verónica I. Marconi – Universidad Nacional de Córdoba
Héctor O. Martín – Universidad Nacional de Mar del Plata
Bernardo Gabriel Mindlin – Universidad de Buenos Aires
Silvina M. Ponce Dawson – Universidad de Buenos Aires
Antonio J. Ramirez Pastor – Universidad Nacional de San Luis
Claudio F. Narambuena – UTN, Regional San Rafael
Fabricio Sánchez-Varretti – UTN, Regional San Rafael
Daniel A. Vega – Universidad Nacional del Sur
Damián H. Zanette – Centro Atómico Bariloche

045 – Estudio de la Activación de CO sobre Clusters Metálicos vs. Superficies Metálicas

Sebastián Amaya-Roncancio¹, Luis Reinaudi^{2*} y M. C. Gimenez³

¹ Departamento de Física, INFAP, CONICET, UNSL, San Luis, Argentina.

² Depto. de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, U.N.C., INFIQC, CONICET, Córdoba, Argentina.

³ IFEG, CONICET, FaMAF, U.N.C., Córdoba, Argentina

* luis.reinaudi@unc.edu.ar

Se realizó el estudio de la adsorción y disociación de CO sobre clusters metálicos M_{13} ($M = Ag, Co, Ni, Fe$), y se comparó la energía de activación de la disociación con el mismo fenómeno sobre las superficies más activas de los mismos metales. Los cálculos de las energías de activación, energías de adsorción y diferencias de densidad electrónica se realizaron a través de Teoría del Funcional de la Densidad Electrónica. Se encontró que el comportamiento de la disociación de CO sobre los clusters metálicos estudiados varía significativamente en comparación con la superficie, siendo en algunos casos dicha variación suficiente para cambiar la naturaleza de la disociación de endotérmica a exotérmica o viceversa.

046 – Estabilidad y distorsión de Clatratos Hidratos de Etileno: Un estudio mediante un modelo de gas de red en 2 Dimensiones

P. Longone^{1*}, P. Centres¹, y A. J. Ramírez-Pastor¹

¹ Infap, Departamento de física, FCMYU, UNSL, Argentina

* pjlongone@unsl.edu.ar, pjlongone@gmail.com

Los hidratos de clatrato son compuestos de inclusión caracterizados por la formación de una red regular que consta de espacios que pueden alojar moléculas de un huésped. En particular, es de interés desarrollar modelos que permitan predecir las condiciones de formación de diversos hidratos y describir sus propiedades. El modelo más utilizado en aplicaciones técnicas es el de van der Waals y Platteeuw (vdW-P). Este modelo es útil para la correlación de datos de formación de hidratos, pero tiene limitaciones en la predicción y el cálculo de variables derivadas, como la capacidad de almacenamiento del hidrato, que son de interés para el desarrollo de nuevas aplicaciones técnicas. Estas limitaciones se deben a suposiciones y simplificaciones introducidas en el modelo, entre las que destaca que se asume que la red de moléculas de agua tiene una geometría fija, mientras que se sabe que las moléculas de huésped distorsionan o deforman la red. Con un modelo de gas de red en 2D, múltiple ocupación de sitios y mediante simulación de Monte Carlo, se desarrolló un estudio del grado de deformación de las cavidades de los hidratos de clatrato de estructura tipo **sl** en presencia de la especie huésped tal como el Etileno (C_2H_4). Con este estudio se logró determinar la condición de mayor estabilidad de este hidrato de clatrato. Como resultado se obtuvo un diagrama de fase calculado a partir del mínimo de la energía libre. Ya que el mínimo de la energía libre coincidía con el mínimo de la deformación de la fase de hidratos. La ocupación total de la molécula de etileno corresponde a un 60% de las cavidades. Donde la molécula de etileno tiene preferencia por las cavidades más grandes. Luego se puede calcular el valor de potencial químico donde existe el valor mínimo de energía libre para cualquier temperatura y desarrollar un diagrama de fase cualitativo que tiene muy buena correspondencia con los experimentos y simulaciones en el continuo en 3D.