

**104a Reunión de la
Asociación Física Argentina**

30 de Septiembre al 03 de Octubre de 2019

Santa Fe, Argentina





104º RAFA - SANTA FE - 2019

Agradecimientos

El Comité Organizador Local de la 104a Reunión de la Asociación Física Argentina (104a RAFA 2019) tiene el placer de recibirlos en la Ciudad de Santa Fe, sin duda un gran desafío y orgullo para nosotros por ser la primera vez en la historia de las RAFA's que la reunión se celebra en nuestra ciudad como representantes de la filial Santa Fe. La Física ha alcanzado un nivel de suma importancia en nuestra ciudad, comenzando en 2005 cuando se creó la carrera de Doctorado en Física, siguiendo con la Maestría en el año 2012, nuestro Instituto de Física del Litoral en 2013, para culminar en este año 2019 con la creación de la Licenciatura. La celebración de la RAFA en Santa Fe viene a coronar este crecimiento.

Agradecemos muy especialmente a las autoridades de AFA Central así como también a su secretaria Virginia Damonte por el apoyo y asesoramiento brindado durante la organización. A todos nuestros colegas de IFIS, CCT-Santa Fe, y a la Universidad Nacional del Litoral, especialmente a Ana María Canal, Secretaria de Ciencia y Tecnología, por el acompañamiento brindado. Este comité también agradece profundamente a todas aquellas instituciones, empresas y personas que con su aporte han posibilitado el desarrollo de la 104a RAFA.

Las actividades previstas en esta ocasión incluyen conferencias plenarias a cargo de distinguidos colegas nacionales y extranjeros, mesas redondas, charlas de división y presentación de posters. Deseamos que ésta sea una gran RAFA para todos, hemos trabajado con mucho esfuerzo y entusiasmo para que así sea. Esperando que la 104a RAFA 2019 satisfaga las expectativas académicas y científicas, y a la vez nos una entre colegas, les damos una afectuosa bienvenida.

**¡Muchas gracias a todos por venir, bienvenidos a Santa Fe!
Comité Organizador Local
30 de Septiembre 2019**

Esta reunión ha sido declarada de interés provincial por la Honorable Cámara de Diputados de la Provincia de Santa Fe, Resolución No1456 del 23 de Mayo de 2019.

formalismo Density Functional Theory mediante el paquete de cálculo VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package). La superficie de Au(111) se representó empleando un "slab" de tres capas donde se relaja solamente la primera capa. Para modelar el sistema Pd/Au(111) se consideraron racimos de átomos de Pd de forma romboédrica, depositados sobre el "slab" de tres capas. Primeramente se procedió a definir la configuración de partida para la reacción de interés. Con ese fin, se estudió la adsorción de HCOOH partiendo de diferentes posiciones y configuraciones iniciales, observando que la más estable es la del isómero trans en posición perpendicular. Posteriormente se evaluó la deshidrogenación de ácido fórmico vía formación del ión formiato (HCOO⁻), determinando el estado de transición correspondiente. A fin de cuantificar la transferencia de carga entre la superficie y el adsorbato, se llevó a cabo un análisis de las cargas atómicas para todos los sistemas mediante el método DDEC6. Se analizaron también las interacciones presentes de tipo no covalente mediante el análisis del índice NCI.

161. Estudio del crecimiento de Sn/Ag(111): explorando la posibilidad de formación de estaneno

Daguerre L¹, Ascolani H²

¹ Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo

² División Física de Superficies, Centro Atómico Bariloche, CNEA-CONICET

En los últimos años los materiales 2D han captado la atención de la comunidad científica debido a sus propiedades físicas superlativas. El estaneno, un compuesto análogo al grafeno pero a base de átomos de Sn, podría poseer propiedades únicas debido al intenso acoplamiento spin-órbita (como el efecto Hall Cuántico de Spin QSH, superconductividad topológica, entre otras) con eventuales aplicaciones en la spintrónica y la computación cuántica. Recientemente, Yuhara et al. [2D Materials 5 (2018) 025002] reportaron la formación de una monocapa de estaneno sobre la aleación de superficie 1/3MC Sn/Ag(111). Siguiendo dicho trabajo, se exploró experimentalmente la posibilidad del crecimiento epitaxial de estaneno al evaporar Sn sobre un sustrato de Ag(111). Resultados parciales utilizando las técnicas de LEED y XPS coinciden con la literatura. En cuanto a las mediciones con UPS/ARPES se obtuvieron las relaciones de dispersión para el estado de superficie de la muestra de Sn/Ag(111).

162. Estudio DFT del proceso de reducción del óxido de grafeno

Domancich N¹, Rossi Fernández A², Fuente S¹, Castellani N¹

¹ Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur

² Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

En los últimos años se han desarrollado varios métodos para la producción de grafeno. Uno de ellos es la exfoliación mecánica, el cual resulta laborioso y con una baja probabilidad de encontrar hojas de grafeno grandes y aisladas. Existen también métodos que producen grafeno mediante el crecimiento epitaxial de monocapas, pero requieren ya sea de condiciones de alto vacío o de procedimientos especializados que aún no se han desarrollado en forma plena. Por último, el método que ha demostrado mayor efectividad en la preparación de

grafeno en grandes cantidades es la reducción de los derivados del grafito, entre los que se encuentra el óxido de grafeno (GO). Recientemente la atención de los investigadores se ha enfocado en la búsqueda de reductores adecuados de GO para la producción de grafeno. La reducción térmica ha probado tener una importante eficiencia en cuanto a la desoxigenación del GO. Sin embargo, el grafeno obtenido presenta una pobre estabilidad coloidal. Por otra parte, si bien la hidracina ha demostrado ser un reductor muy efectivo, su uso a gran escala representa tanto un problema de seguridad como ambiental, debido a que este compuesto es altamente tóxico y potencialmente explosivo. Por ese motivo, ha surgido en la actualidad un gran interés en utilizar reductores menos activos que sean amigables con el medio ambiente. Uno de ellos es la dopamina (DA), la cual ha demostrado ser un buen reductor en condiciones convenientes de temperatura y tiempo de reacción. Además, este compuesto metabólico exhibe propiedades de autopolimerización, inhibiendo la aglomeración de las láminas de grafeno debido a su carácter hidrofóbico. En el presente trabajo se realizó un estudio teórico relativo al proceso de reducción de distintos modelos de la superficie basal de GO, empleando como agente reductor la forma zwitteriónica de la DA (ZDA). Cabe destacar que en un trabajo previo se ha demostrado que la ZDA interactúa más fuertemente que la DA con una superficie metálica de Ag. Los cálculos se realizaron en el marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT), empleando el programa VASP (Vienna Ab-initio Simulation Program). Se incluyeron efectos dispersivos mediante el método DFT-D2 de S. Grimme. Para modelar la superficie de GO se empleó un modelo periódico, con una celda hexagonal $5 \times 5 \times 1$ y un espacio vacío en la dirección normal al GO, considerando varias configuraciones de 5 grupos funcionales epoxi (GO5) o de 5 grupos hidroxilo (G(OH)5). Para cada sistema considerado se produjo el acercamiento de la molécula ZDA hacia uno de dichos grupos funcionales, orientando su anillo aromático de forma paralela con respecto al plano basal de GO. En todos los casos la energía de adsorción resultó ser exotérmica. Se observó que la molécula de ZDA se adsorbe de manera no disociativa sobre los sistemas GO5, mientras que lo hace disociativamente sobre algunos de los sistemas G(OH)5. En esta última situación, un átomo de H del grupo amino de la ZDA se combina con un grupo hidroxilo de la superficie GO, produciendo una molécula de H₂O, que permanece anclada cerca de la superficie reducida. Es preciso señalar que la adsorción no disociativa en ZDA/GO5 se acompaña con una importante transferencia electrónica hacia el sustrato.

163. Estudio DFT de modelos de óxido de grafeno

Domancich N¹, Rossi Fernández A², Meier L¹, Fuente S¹, Castellani N¹

¹ Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur

² Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

En la actualidad, uno de los métodos más utilizados para producir láminas de grafeno con fines tecnológicos se basa en la reducción de láminas de óxido de grafeno (GO) mediante métodos térmicos o químicos. Si bien dicho material no tiene una estructura periódica perfectamente definida ni corresponde a una estequiometría exacta, en general se acepta que las láminas de GO muestran principalmente grupos oxigenados epoxi e hidroxilo en los planos basales. En el presente trabajo se estudió teóricamente la estabilidad y las propiedades estructurales de varios modelos de GO, los cuales presentan distintos números de grupos