

**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.*

grafeno en grandes cantidades es la reducción de los derivados del grafito, entre los que se encuentra el óxido de grafito (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 H<sub>2</sub>O, 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 N<sup>1</sup>, Rossi Fernández A<sup>2</sup>, Meier L<sup>1</sup>, Fuente S<sup>1</sup>, Castellani N<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur

<sup>2</sup> 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

oxigenados. 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), y se utilizó un modelo periódico, con una celda hexagonal  $5 \times 5 \times 1$  y un espacio vacío en la dirección normal al GO. En primer lugar, se examinaron las propiedades de distintos modelos GO3, con tres grupos epoxi, dispuestos según distintas configuraciones. Luego, se agregaron dos grupos epoxi adicionales para así obtener las estructuras GO5. Por otro lado, también se estudiaron las propiedades de modelos de GO con tres y cinco grupos hidroxilos,  $G(OH)_3$  y  $G(OH)_5$ , respectivamente. Se calculó la energía de formación para la incorporación de epoxis e hidroxilos al grafeno,  $E_{form}$ , en los distintos modelos estudiados, y se observó que los valores obtenidos de  $E_{form}$  corresponden a procesos exotérmicos. Cabe destacar que la magnitud de  $E_{form}$  para epoxis es alrededor de 1 eV mayor que para los hidroxilos, lo que indica que el anclaje de un átomo de O es más favorecido que el de un grupo hidroxilo. La magnitud de  $E_{form}$  expresada en forma normalizada por grupo oxidante, en el caso de los grupos funcionales epoxi, aumenta en 0,3 eV cuando el número de epoxis cambia de 1 a 3 y luego disminuye en promedio 0,1 eV cuando dicho número cambia de 3 a 5. Además, en el caso grupos funcionales hidroxilo, el valor normalizado de  $|E_{form}|$  aumenta 0,4 eV cuando el número de hidroxilos cambia de 1 a 3 y luego disminuye a menos de 0,1 eV cuando dicho número cambia de 3 a 5. Como conclusión general, se observa que a medida que aumenta el número de grupos epoxi e hidroxilos sobre la superficie del grafeno, el sistema resultante se vuelve más estable.

#### 164. Estudio DFT para la adsorción de SO<sub>2</sub> en superficies de interés catalítico (CeO<sub>2</sub>, ZnO, ZnO/CeO<sub>2</sub>)

Reimers W<sup>1</sup>, Zubieta C<sup>3</sup>, Ferullo R<sup>3</sup>, Branda M M<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur

<sup>2</sup> Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur

<sup>3</sup> Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

<sup>4</sup> Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL

Es sabido que el dióxido de azufre, SO<sub>2</sub>, es uno de los mayores contaminantes en todo el mundo [1-3]. Actualmente, a pesar de las iniciativas gubernamentales orientadas al control de emisiones contaminantes, continúan en vigencia episodios de contaminación ambiental por SO<sub>2</sub>. Este trabajo se orienta a estudiar algunos sustratos para la adsorción y posterior eliminación del SO<sub>2</sub> con el fin de reducir el efecto nocivo de dicho gas sobre la salud humana y medio ambiente. Se estudiaron diferentes sitios de adsorción de la molécula de SO<sub>2</sub> sobre las superficies de CeO<sub>2</sub>(111), CeO<sub>2</sub>(331) y ZnO(0001) -perfectas y con vacancias de oxígeno, como así también monocapas soportadas: Zn/CeO<sub>2</sub> CeO<sub>2</sub>/Zn [4-5]. Para ello, se utilizó teoría del funcional de la densidad (DFT). Se encontró que las superficies más reactivas son aquellas que presentan vacancias de oxígeno o defectos tipo escalón (CeO<sub>2</sub>(331)) y la superficie con monocapa de ZnO. La superficie escalonada de ceria, además de ser buen adsorbente, oxida a la molécula formando SO<sub>3</sub>-. Por último se calcularon las barreras de transición para la posible escisión de la molécula óxido de Azufre en las superficies de mayor adsorción.