

**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.

elucidar los efectos de redistribución de carga que se evidencian en la superficie en respuesta al acercamiento del ión. Este fenómeno se estudia mediante el análisis de carga imagen inducida en la superficie por parte del ión que se deposita. En el presente trabajo se abordó esta temática, mediante el modelado con dinámica molecular clásica para analizar los cambios de carga superficiales ocurridos cuando se aproxima un ión Cu^+ a un electrodo de $\text{Au}(100)$ y a uno de $\text{Cu}(100)$. Para ello, se modelaron los sistemas adoptando una metodología [1] que habilita a evaluar los efectos de polarización instantánea inducida en las superficies, por medio de un potencial polarizable simple, compatible y preciso, que consiste en un potencial de Lennard-Jones y un par electrón-núcleo armónicamente acoplado para cada átomo de la superficie metálica. Este modelo reproduce la carga imagen del ión que se adsorbe en la superficie, así como las propiedades de superficie, material masivo e interfase.

Los resultados permiten elucidar cómo se modifica la interacción catión-superficie en comparación con las interacciones anión-superficie (tomando como referencia la deposición de Cl^- sobre $\text{Au}(100)$ [1]) y con las interacciones catión-superficie sin considerar el efecto de carga imagen. Los cambios se atribuyen a una redistribución electrónica superficial provocada por la carga imagen del ión que se aproxima a la superficie. Se logró simular y analizar el efecto de carga imagen en la deposición de Cu^+ sobre superficies de $\text{Au}(100)$ y $\text{Cu}(100)$, que constituye la primera etapa de evaluación de un sistema mucho más amplio que incluye la incorporación de sistemas iónicos complejos. En base a esto, se pretende diseñar nuevos materiales para lograr un mejor rendimiento en baterías.

[1] I. L. Geada, H. Ramezani-Dakheel, T. Jamil, M. Sulpizi, H. Heinz, Nat. Commun. 9 (2018) 716.

159.

160. Estudio de la descomposición de ácido fórmico sobre Pd/Au(111) para obtener H_2

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

¹ Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur

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

El ácido fórmico se encuentra en la naturaleza o se puede sintetizar fácilmente en el laboratorio. En los últimos años, se ha utilizado como material de almacenamiento de hidrógeno. Si a esto último se aúna la alta eficiencia lograda en las celdas de combustible, el ácido fórmico podría servir en el futuro como uno de los mejores combustibles para dispositivos portátiles, vehículos y otras aplicaciones relacionadas con la energía. Hay dos vías posibles para la descomposición de HCOOH : la deshidrogenación (HCOOH a $\text{CO}_2 + \text{H}_2$) y la deshidratación (HCOOH a $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$). En el caso de la deshidrogenación, partiendo del ácido fórmico adsorbido se puede obtener el ión formiato, que posteriormente se deshidrogena para dar CO_2 . En particular, en la última década, se han logrado avances significativos en el desarrollo de catalizadores para la generación selectiva de hidrógeno a partir de ácido fórmico. En el presente trabajo se estudia la adsorción y descomposición del ácido fórmico sobre el sistema Pd/Au(111). Los cálculos correspondientes se llevaron a cabo dentro del

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