



$$\begin{bmatrix} RA \\ FO \end{bmatrix} = [\beta, \beta] \rightarrow \text{wind turbine icon}$$

la Teoría de la Funcional Densidad utilizando cálculos de primeros principios.

El modelado de la superficie fue realizado a partir de la estructura prístina de Na-MMT, construyendo súper celdas de 2 capas separadas con vacío de 25Å de espesor, considerando diferentes orientaciones. A su vez, la magnetita se modeló en forma de nano cluster de fórmula Fe_3O_4 . Las superficies así obtenidas tanto como el clúster fueron optimizados previo a la construcción del sistema compuesto. Por medio del análisis energético se determinó que la superficie más factible es la 001. Se analizaron diferentes sitios de adsorción sobre dicha superficie mediante un acercamiento del cluster por pasos, partiendo desde una distancia de 8Å, y luego acercando cada 2Å hasta llegar a los sitios seleccionados[3], permitiendo en cada uno la relajación del sistema. A través del análisis energético se establecieron los sitios más probables de adsorción. Una vez determinados, se calcularon los parámetros hiperfinos en el sitio del Fe para su comparación con resultados experimentales obtenidos con espectroscopía Mössbauer.

Referencias

[1] Uddin MK. A review on the adsorption of heavy metals by clay minerals, with special focus on the past decade. *Chemical Engineering Journal*. Enero de 2017;308:438-62.

[2] Montes ML, Barraqué F, Bursztyn Fuentes AL, Taylor MA, Mercader RC, Miehé-Brendlé J, et al. Effect of synthetic beidellite structural characteristics on the properties of beidellite/Fe oxides magnetic composites as Sr and Cs adsorbent materials. *Materials Chemistry and Physics*. abril de 2020;245:122760.

[3] Wungu TDK, Yusfi M, Suprijadi S. A Density Functional Theory Study on using Montmorillonite to Reduce Air Pollution. *MST*. 20 de diciembre de 2020;24(3):99.

Poster ID: MC-61

Nanopartículas de ZnO puras y dopadas con metales de transición: estudio de la respuesta de fotoluminiscencia bajo exposición a vapor de etanol y de la actividad fotocatalítica

Cornet M^{1 2 3}, Pais Ospina D^{1 2 3}, Comedi D^{1 2 3}, Tirado M^{1 2 3}, Marin-ramirez O^{1 2 3}

¹ *Universidad Nacional de Tucumán (UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología (FACET), Departamento de Física, Nanoproject – Laboratorio de Nanomateriales*

² *Universidad Nacional de Tucumán (UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología (FACET), Departamento de Física, Laboratorio de Física del Sólido*

³ *Universidad Nacional de Tucumán (UNT), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Instituto de Física del Noroeste Argentino (IFINOA)*

El óxido de zinc (ZnO) es un semiconductor II-VI que ha generado un cre-

ciente interés en las últimas décadas debido a sus prometedoras aplicaciones en electrónica y óptica. Su amplio potencial se basa en su gap directo de 3,37 eV y su robusta energía de ligadura excitónica de 60 meV, que le confieren una emisión de luz sólida a temperatura ambiente. Esta emisión de luz está fuertemente influenciada por factores como la estructura de defectos y la superficie del material. La motivación para este estudio surgió a partir de resultados previos de nuestro grupo sobre la fotoluminiscencia de aglomerados de nanopartículas (NPs) de ZnO, la cual mostró una dependencia no monótona del número de NPs, la potencia de excitación y la exposición a vapor de etanol [1]. Estos fenómenos fueron vinculados a la auto-absorción de los fotones emitidos y al equilibrio entre la recombinación excitónica dentro de NPs aisladas y la recombinación no radiativa a través de estados superficiales o interfaciales. Con base en estos hallazgos, se decidió profundizar en el estudio de la emisión de luz en sistemas nanoestructurados, considerando el efecto del ambiente circundante y el tamaño de las estructuras que conforman el aglomerado.

Para llevar a cabo el estudio, se fabricaron muestras que permitieran comprender mejor la influencia de las distintas variables en el comportamiento observado. Se sintetizaron polvos de micropartículas (MPs) de ZnO ($\sim 1 \mu\text{m}$) y polvos de NPs ($\sim 20 \text{ nm}$) de ZnO, ZnO:Mn y ZnO:Cu (ambos al 1% nominal) mediante síntesis solvotermal. El polvo de NPs de ZnO se dividió en tres grupos: uno sin modificar, otro sometido a calcinación en una atmósfera rica en oxígeno y un tercero calcinado en una atmósfera rica en hidrógeno. Las muestras se caracterizaron mediante microscopía de barrido electrónico y espectroscopía Raman. Experimentos de absorbancia UV/vis permitieron estimar el borde de absorción y gap óptico de las muestras. Las mediciones de fotoluminiscencia (FL) se realizaron mediante la excitación con un láser de HeCd ($\lambda = 325 \text{ nm}$) de manera sucesiva; primero en aire atmosférico, luego durante la exposición de las muestras a vapor de etanol, y por último nuevamente en aire atmosférico. Para ello, los polvos se depositaron en pequeños sustratos de silicio mediante drop-coating, obteniendo sistemas con 20 y 60 deposiciones de cada uno de los polvos.

Los resultados revelaron que la FL del sistema formado por MPs apenas se vio afectada por la exposición al vapor orgánico. En cambio, el sistema formado por NPs mostró un notable aumento de la emisión UV y una disminución de la emisión visible durante la exposición. Además, los sistemas con mayor número de deposiciones exhibieron una mayor respuesta a la presencia del vapor. La mejor respuesta fue observada para el sistema de 60 deposiciones de ZnO:Cu en presencia de etanol, aumentando la señal 7 veces durante la exposición a etanol en relación a la medida en aire atmosférico. Por último, se observó que, en todos los casos, después de detener las exposiciones al vapor de etanol, los sistemas recuperaron su comportamiento original de FL. Estos resultados sugieren que la

respuesta de la FL en sistemas granulares de ZnO al vapor de etanol está dominada por las modificaciones en las propiedades optoelectrónicas de las interfaces partícula/partícula, inducidas por las moléculas orgánicas incidentes.

Tras obtener resultados prometedores en los estudios de FL, se procedió con la evaluación de la actividad fotocatalítica de las muestras utilizando azul de metileno como indicador. Los experimentos se realizaron empleando una solución de azul de metileno de concentración 5 mg/l, una concentración de fotocatalizador de 300 mg/l, e iluminando con una lámpara comercial LED de $\lambda = 365$ nm y 3 W de potencia durante un periodo de 75 minutos.

El polvo de ZnO nanoparticulado mostró una eficiencia de degradación del 88 %. Sin embargo, los mejores resultados se obtuvieron para la muestra de ZnO calcinado en O_2 , la cual alcanzó una eficiencia del 90 % en la degradación del azul de metileno.

[1] Oscar Marin, Gustavo Grinblat, Mónica Tirado and David Comedi, Nano-Structures & Nano-Objects 26, (2021), 100734.

Poster ID: MC-62

Ciclos magnéticos RF de metales amorfos constituidos por nanocristales de hierro (FINEMET): Caracterización mediante técnica ESAR

Asorey C N¹, Cattaneo S¹, Barco G¹, Zarragoicochea H¹, Bruvera I²

¹ Departamento de Física. Universidad Nacional de La Plata

² Instituto de Física La Plata. CONICET

Los ciclos de histéresis magnética ofrecen valiosa información sobre la magnetización $M(t)$ presente en un material ferromagnético en respuesta a un campo magnético externo variable $H(t)$.

Los ferromagnetos en particular muestran una relación no lineal entre H y M. Esto último, en conjunto con la existencia de una magnetización remanente a lo largo del ciclo, provoca que el material disipe energía en forma de calor.

Particularmente, en el caso de los materiales magnéticos amorfos, que se caracterizan por su estructura atómica no cristalina, se observa una menor magnetización remanente en respuesta al campo $H(t)$. Esto se traduce en una menor disipación de energía en forma de calor en comparación con otros ferromagnetos.

Al trabajar con un ferromagneto, la técnica ESAR (*Electromagnetic Specific Absorption Rate*) se utiliza para evaluar cómo el material absorbe energía de los campos aplicados. Se realiza mediante la medición de la tasa de absorción de energía electromagnética por unidad de masa del material. Mediante esta técnica obtenemos $M(H)$ a partir de ciclos producidos a RF. En este trabajo se caracterizó una muestra de $Fe_{13,5}Cu_1Nb_3Si_{13,5}B_9$ a diferentes frecuencias y amplitudes de