

PRÓLOGOS:

Ana Franchi
Dora Barrancos
Luz Lardone

COORDINACIÓN:

Constanza Estepa
Lucía Desuque
Marina Baima



VOCES FEMENINAS EN LA INVESTIGACIÓN

Informes técnicos

* UNRaf
Ediciones

Santa Fe
Provincia



VOCES FEMENINAS EN LA INVESTIGACIÓN
Informes técnicos



VOCES FEMENINAS EN LA INVESTIGACIÓN

Informes técnicos



Franchi, Ana

Voces femeninas en la investigación: Informes técnicos / Ana Franchi;
Dora Barrancos; Luz Lardone; Coordinación general de Constanza
Estepa; Lucía Desuque; Marina Baima.

- 1a ed. - Rafaela: Ediciones UNRaf, 2023.

936 p.; 21 x 15 cm.

ISBN 978-987-4920-56-0

1. Proyectos de Investigación. 2. Informes Técnicos. 3. Mujeres. I. Estepa,
Constanza, coord. II. Desuque, Lucía, coord. III. Baima, Marina,
coord. IV. Título.

CDD 300



VOCES FEMENINAS EN LA INVESTIGACIÓN

Informes técnicos

Coordinación

Constanza Estepa, Lucía Desuque, Marina Baima

Dirección Editorial

Constanza Estepa

Edición

Constanza Estepa, Julia Bisio, Renata Dumas

Corrección

Lucía Desuque

Diseño de tapa

Carla Gobbi

Maquetación

Lucas Mililli | Estudio Metonimia

Producción y comunicación

Carla Gobbi, Cecilia Pelliza, Facundo Ruiz Baleani

ISBN 978-987-4920-56-0

Queda hecho el depósito que establece la ley 11.723.

Prohibida su reproducción total o parcial.

Este libro se terminó de imprimir en el mes de septiembre de 2023
en **XANTO** [Conceptos Gráficos] | Mattos 3373 | Tel: 4333587 - 5251451
info@xanto.com.ar | Crespo 2300 | Rosario | Santa Fe | Argentina.

Tirada de 120 ejemplares.

AUTORIDADES

Gobernador de la Provincia de Santa Fe
OMAR ÁNGEL PEROTTI

Ministro de Producción, Ciencia
y Tecnología de Santa Fe
DANIEL COSTAMAGNA

Ministra de igualdad, Género
y Diversidad de Santa Fe
FLORENCIA MARINARO

Secretaría de Ciencia,
Tecnología e Innovación
MARINA BAIMA

Secretaria de Administración
MELINA GAVATORTA

ÍNDICE

PRESENTACIÓN	23
por <i>Constanza Estepa</i> y <i>Lucía Desuque</i>	
PREFACIO	31
por <i>Dora Barrancos</i>	
PRÓLOGO	35
por <i>Ana Franchi</i>	
PRÓLOGO	39
por <i>Luz Lardone</i>	

ESTANCIAS DE MOVILIDAD INTERNACIONALES INVESTIGADORAS INVITADAS

Un viaje propio	51
por <i>Marcia Arbusti</i>	
Acuaponía, un modelo sostenible y agroecológico de cultivo de peces, crustáceos y vegetales para la alimentación humana	65
por <i>Débora De Azevedo Carvalho</i>	

Diseño teórico de nuevos materiales para baterías 77
por *Estefanía Colombo*

**Productoras agroecológicas en el sur de Santa Fe.
Un abordaje sobre la historia argentina reciente** 87
por *Laura Pasquali*

**Eje Intestino-Cerebro: ¿cómo se transmite
la información desde la madre a la progenie?** 95
por *María Florencia Rossetti*

**Estadía de perfeccionamiento en técnicas
de caracterización *in-situ* de superficies:
XPS a presiones cercanas al ambiente (NAP-XPS)** 109
por *Ana María Tarditi*

ESTANCIAS DE INVESTIGACIÓN

**Técnicas ecofisiológicas y relaciones
parásito-hospedador en aves** 123
por *Sofía Irene Arce*

**Materiales basados en celulosa para liberación
modificada de componentes activos** 137
por *María Cecilia Balbi*

**Enfoque multitecnológico destinado a mejorar
la farmacoterapia de la enfermedad de Chagas** 153
por *Giselle Rocío Bedogni*

**Política y estética en repertorios de protesta
y activismos políticos en espacio público
de los feminismos** 161
por *Luciana María Bertolaccini*

Estudio de una estrategia de vacunación basada en el direccionamiento de antígenos de <i>Trypanosoma cruzi</i> a células dendríticas	179
por <i>Lucía Biscari</i>	
Metodologías participativas para la participación ciudadana. Una aproximación a la experiencia de la Red CIMAS de la Universidad Complutense de Madrid	197
por <i>Lucía Caisso</i>	
Bioindicación con invertebrados acuáticos	205
por <i>Julieta Capeletti</i>	
Caracterización de la diversidad de <i>Leptospira spp.</i> en muestras de ambientes acuáticos de Santa Fe, Argentina	209
por <i>Julieta Verónica Carletti</i>	
Fortalecimiento de la cadena algodonera: fitomejoramiento y manejo integrado del cultivo de algodón	215
por <i>Antonela Estefanía Cereijo</i>	
Vigilancia Sanitaria de anomalías congénitas en la Provincia de Santa Fe: evaluación de factores de riesgo maternos y ambientales	223
por <i>Carlina Colussi</i>	
Estancia de investigación en el Centro de Estudios Sociológicos sobre la Vida Cotidiana y el Trabajo (QUIT) de la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB)	233
por <i>Tania Fabrina Corsetti</i>	

**Los aportes de las criminologías feministas
a los estudios sobre mujeres y mercados de drogas
ilegalizadas** 247
por *Carolina D'Amelio*

**Desarrollo de nanocatalizadores a partir
del desecho agroindustrial cáscara de arroz
de la región santafesina para su utilización
en procesos de captura de CO₂** 267
por *Betina María Cecilia Faroldi*

**Articulaciones internacionales e interdisciplinarias.
En busca de la arquitectura como “interfaz pedagógica”
en las ciudades de Madrid, Berlín y Rosario** 275
por *Florencia Fernández Méndez*

**Epigenética y aclimatación de hortalizas
al estrés ambiental** 295
por *Lucía Victoria Ferrero*

**Informe de la estancia de investigación sobre
organizaciones, políticas y activistas en torno
a las migraciones, los derechos humanos,
el antirracismo y la diversidad de género
en Pamplona, Navarra, España, 2022** 297
por *Mariana Beatriz García*

**Clara alternativa a surfactantes de origen sintético:
exploración de la producción de biosurfactantes
por *Pseudomonas syringae pv tabaci* mediante
la fermentación en estado sólido y la revalorización
de residuos de la industria alimentaria** 307
por *Carla Nahir Haidar*

Método para estimar un indicador de la calidad del aire basado en la atenuación de la radiación solar 323
por *Adriana Ipiña Hernandez*

Caracterización de plantas de *Arabidopsis thaliana* sobre-expresantes del gen MsMDHAR de alfalfa con posible resistencia a estrés abiótico 339
por *Camila Jaime*

Resignificar el acceso a la justicia desde la óptica de la Defensoría Pública de San Pablo, Brasil 349
por *Claribel Lingiardi*

Políticas de género y ciencia en Argentina y España 361
por *Sacha Victoria Lione*

Modulación de la topología del genoma por secuencias de repeticiones invertidas (IR) durante procesos de adaptación en plantas 377
por *Regina Mencía*

El *invencible verano* del feminismo universitario en América Latina. Articulaciones estratégicas entre México y Argentina 381
por *Rocío Mariel Moltoni*

Comportamiento postcosecha de naranjas “Salustiana” y “Lane Late” durante envíos a ultramar bajo diferentes condiciones de temperatura. Estudios físico-químicos y sensoriales 395
por *Luisina Lourdes Morales*

Estadía de perfeccionamiento en uso de técnicas de caracterización de superficies y estudio específico de materiales lignocelulosos y sus derivados 413
por *María Fernanda Mori*

Tendencias de la temperatura mínima en las últimas décadas y las heladas en la pampa húmeda 421
por *Gabriela Viviana Müller*

Microdissección cromosómica para la síntesis de una sonda cromosómica específica de *Caiman latirostris* (yacaré overo) con aplicación futura en evaluación de daño genotóxico específico 433
por *Lucía Magdalena Odetti*

Estancia de investigación en la Faculdade de Ciências de la Universidad Estadual Paulista (UNESP) para desarrollar actividades en materiales compuestos con memoria de forma y estimulación remota obtenidos a partir de poliuretanos y nanopartículas de oro 443
por *María Lis Polo*

Notas acerca de mi primera estancia de investigación en el sur de Brasil 461
por *Agostina Razzetti Koller*

Optimización de la producción de microalgas en fotobiorreactores y biorrefinería con especies de interés biotecnológico 469
por *Luciana Regaldo*

Pasantía en el Centro de Ingeniería Biológica, Universidad de Minho (Campus de Gualtar, Braga, Portugal) para realizar la extracción de proteínas de espirulina por técnicas amigables con el medio ambiente y evaluar la digestión gastrointestinal de dichos aislados proteicos 485
por *María Florencia Sanchez*

Cuerpo y género. Diálogos feministas para la cultura y la educación física en la sociedad contemporánea 493
por *María Laura Schaufler*

Estudio del transporte de hemo y hemoglobina en mutantes endocíticas nulas de *Trypanosoma cruzi* 513
por *Evelyn Tevere*

Cría y parasitismo entre *Cerastitis capitata* (Diptera: Tephritidae) y *Psytalia concolor* (Hymenoptera: Braconidae) 523
por *María Amalia Trod*

Difusión e implementación de modelos policiales alternativos en Santa Fe y Uruguay 531
por *Rocío María Truchet*

Sistema de economía circular. Procesamiento de residuos de las empresas agroindustriales para alcanzar el objetivo de cero residuos mientras se produce proteína de microalgas para la alimentación animal y obtención de compuestos bioactivos 541
por *María Belén Velázquez*

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS CIENTÍFICOS

La transmisión de valores familiares al gobierno de la empresa 555
por *Noelia Caren Barberis*

Alcances y desafíos de la Economía Popular, Social y Solidaria del sur de Santa Fe como estrategia laboral y productiva para la reactivación económica en la post-pandemia. Difusión de estudios locales y fortalecimiento de las estrategias colectivas y las políticas públicas 567
por *María Victoria Deux Marzi*

El despliegue del gobierno de la (in)seguridad en el marco de la racionalidad neoliberal: desde las estrategias de prevención del delito a las desapariciones forzadas 579
por *Luciana Noelia Ginga*

La vía de utilización de ácido lipoico en *Staphylococcus aureus* es un blanco prometedor para el desarrollo de antimicrobianos 589
por *Albertina Scattolini*

Desarrollos en Suramérica del Conocimiento Matemático para la Enseñanza en la Formación Docente de Profesores en Matemática 601
por *Natalia Fátima Sgreccia*

Presentación del trabajo “Una aproximación metodológica para estudiar las experiencias de las trabajadoras de la educación de la ciudad de Rosario en el marco de la pandemia del COVID-19”. El desafío de entrevistar en la 9ª Conferencia Latinoamericana y Caribeña de Ciencias Sociales 609
por *Lorena Luz Sguigna*

Actividades académicas en clave de género. Breve recorrido sobre una experiencia personal 617
por *Maialen Somaglia*

Diálogos en torno a investigaciones sobre políticas estatales y organizaciones indígenas en Argentina y Colombia 623
por *María Victoria Taruselli*

Reflexiones teóricas sobre las migraciones recientes en la ciudad de Rafaela, Santa Fe 635
por *Denise Zenklusen*

ESTANCIAS DE MOVILIDAD NACIONALES ESTANCIAS DE INVESTIGACIÓN

Aspectos ecológicos y filogenéticos como determinantes de las comunidades parasitarias en ofidios del Chaco argentino 657
por *Vanesa Arzamendia*

Iniciación en el desarrollo de modelos computacionales: glicomacropéptidos y polielectrolito ácido 663
por *Sofía Baldor*

Diversidad y ecología de reptiles y anfibios del Chaco Seco Argentino, un estudio con énfasis en sus características tróficas y reproductivas 671
por *Gisela Bellini*

Derivas de las Becas de Movilidad con perspectiva de género: alfabetización académica y escritura profesional en la Licenciatura en Trabajo Social 677
por *Pamela Virginia Bórtoli*

Caracterización y análisis estructural de nuevas fases sólidas de ingredientes farmacéuticos activos 687
por *Natalia Lorena Calvo*

Temas de indagación: abordaje de la violencia de género contra las infancias en instituciones escolares 705

por *Carolina Cravero*

Pasantía en el Instituto de Tecnología de Alimentos y Procesos Químicos (UBA-CONICET) para evaluar la interacción entre proteínas lácteas y antioxidantes como estrategia de estabilización 713

por *Ornella Ferreyra*

Cartografías diversas: experiencias y prácticas de mujeres y diversidades sexuales en la producción social de espacios de encuentro y visibilidad identitaria en la ciudad de Santa Fe (1980-2024) 723

por *Dianela Jael Gabn*

Calidad bacteriológica en ecosistemas acuáticos circundantes a la ciudad de Santa Fe: caracterización de los mecanismos de resistencia a antibióticos y marcadores genéticos asociados 739

por *María Josefina González*

Comunidades microbianas y reciclado de nutrientes en sistemas acuáticos continentales 745

por *María Florencia Gutiérrez*

***Trypanosoma cruzi* ¿un héroe en la lucha contra el cáncer? Predicción de epítomos T y análisis inmunopeptidómico de la reactividad cruzada como estrategia racional para el diseño de inmunoterapias antitumorales 747**

por *Cintia Daniela Kaufman*

Ensayos de citotoxicidad 759

por *Georgina Martini*

Obtención y caracterización de carbones magnéticos para ser utilizados en descontaminación de efluentes provenientes de la industria ganadera	775
por <i>María del Rosario Morel</i>	
Los museos de arte y sus públicos	787
por <i>Alejandra Gabriela Panozzo Zenere</i>	
Nanoecotoxicología: Evaluación de efectos letales y subletales de nanopartículas (NPs) metálicas sobre organismos acuáticos de distinto nivel trófico	801
por <i>Natalí Romero</i>	
Trabajo de campo en el Instituto de Cultura Popular (INCUPO) en la ciudad de Resistencia y Corrientes	813
por <i>María Cecilia Telleria</i>	
Caracterización bioquímica, nutricional y anatómica del maqui (<i>Aristotelia chilensis</i>), una baya nativa de los bosques Andino Patagónicos	829
por <i>Karina Eva Josefina Tripodi</i>	

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS CIENTÍFICOS

La unidad económica agraria. Un análisis desde su dimensión ecológica como herramienta jurídica para la protección del suelo: el caso Provincia de Santa Fe	839
por <i>María Valeria Berros</i>	
Síntesis, caracterización y desempeño catalítico de diferentes materiales	851
por <i>María Verónica Bosco</i>	

Optimización de catalizadores de Co y Ni soportados sobre CeO₂ frente al reformado de etanol con vapor de agua 857
por *Florencia Dalotto*

Gasificación catalítica de biomasa a escala banco para generar energía 863
por *Lina Vanesa García Peña*

Participación en la 6° Edición del Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas “CLICAP 2022” y su evento asociado, el 5° Encuentro AUSAL, con el trabajo: “Incorporación de harina de lentejas fermentada con kéfir en magdalenas de chocolate: análisis del perfil de textura” 869
por *Micaela Parmigiani*

Presentación de Trabajo de Investigación en XXII Congreso Argentino de Catálisis: “Purificación de 1-Penteno en Corrientes Alqueno/Alquino con Catalizadores de Pd-soportado: Efecto del Soporte y Cloro Residual” 877
por *Mónica Quiroga*

“Caracterización de tars de pirólisis de biombras residuales” en el XXII Congreso Argentino de Catálisis 891
por *Paula Judith Saires*

Catalizadores porosos de TiO₂, ZrO₂ y TiO₂-ZrO₂ para la conversión de biomasa lignocelulósica 905
por *Inés Silvia Tiscornia*

**Catalizadores basados en óxido de cerio empleados
en procesos catalíticos sustentables:
divulgación de resultados científicos
en el XXII Congreso Argentino de Catálisis 919**
por *María Julia Vecchietti*

EPÍLOGO

**Nuestras Voces en la Investigación:
Género con Ciencia 925**
por *María Florencia Marinaro*

EPÍLOGO 927
por *Marina Baima*

SOBRE LAS AUTORAS 931

Diseño teórico de nuevos materiales para baterías

ESTEFANÍA COLOMBO

Objetivos

El objetivo de la estancia de investigación en el Instituto de Química Teórica de la Universidad de Ulm fue trabajar en conjunto con colegas internacionales para avanzar en la investigación en torno a la deposición de metales para diseño de nuevos materiales para baterías. El trabajo de cooperación entre el grupo de Química Teórica de la Universidad de Ulm y nuestro grupo de trabajo (Grupo de Química Teórica y Computacional del IQAL, CONICET/UNL), se lleva a cabo desde hace más de una década, y ha dado lugar a numerosas investigaciones y publicaciones en conjunto, motivo por el cual se hace foco en mantener y fortalecer este vínculo. El trabajo se orienta al diseño de nuevos y más eficientes materiales para baterías, mediante el estudio y modelado teórico de la deposición de metales. Es importante remarcar que la innovación en materiales de electrodo es actualmente un tema central de investigación, debido a su importancia para la utilización en dispositivos

de almacenamiento de energía, y en este contexto, nuestro trabajo plantea la obtención de los conocimientos necesarios para el mejoramiento de dichas tecnologías. Hoy en día y con los enormes avances logrados en la capacidad de cómputo, la aplicación de métodos químicos computacionales para el modelado teórico de sistemas reaccionantes permite obtener información nueva y/o complementaria a la obtenida a nivel experimental. Los conocimientos que de aquí se desprenden contribuyen al avance de la ciencia en el área electroquímica y en los campos de energías renovables, no sólo a nivel provincial y nacional sino también internacional.

El tema de la movilidad se vincula a su vez de manera directa con las actividades de la becaria, ya que está enmarcado en el tema de la beca posdoctoral de Conicet, cuyo título es “Baterías: elucidando el rol de la formación de complejos en la deposición de metales”, la cual fue ganada dentro de la convocatoria de Temas Estratégicos (Tema Estratégico: Energía e Industria: Sistemas de acumulación de energía – Baterías) debido al interés actual que concierne al tema, tanto en el ámbito académico/teórico, como en el ámbito tecnológico/industrial.

La invitación por parte del Dr. Prof. Wolfgang Schmicler, líder del grupo anfitrión, junto con el financiamiento de Movilidad para Mujeres Científicas ofrecido por el Ministerio de Ciencia y Tecnología de la Provincia de Santa Fe, constituyeron una excelente oportunidad para complementar las actividades como becaria posdoctoral, principalmente en lo referente a la utilización de técnicas teóricas para el estudio y análisis de reacciones de interés tecnológico. Por otro lado, la actividad también resultó provechosa para todo el grupo, ya que se pudo avanzar con trabajos en los cuales venimos abocados, a la vez que forja las relaciones para que trasciendan la estadía y habilita a continuar trabajando y publicando en conjunto.

Marco teórico y antecedentes

La deposición y disolución de metales son eventos fundamentales para los procesos electroquímicos y constituyen la base del funcionamiento de algunos tipos de baterías. Existe una gran cantidad de investigaciones experimentales sobre la deposición de metales (Paunovic & Schlesinger, 2006), sin embargo, la cinética de deposición a nivel atómico aún no es bien comprendida. Esto es particularmente cierto para la deposición de iones multivalentes, que involucra varias etapas y además necesita aditivos que aceleran la reacción por formación de complejos. El interés por la deposición de metales se ha reavivado por la investigación en baterías de litio, que alimentan muchos dispositivos electrónicos y una creciente flota de vehículos eléctricos. Sin embargo, la tecnología de la batería de litio se acerca a la cantidad máxima de energía que puede almacenarse por volumen, por lo que hay una necesidad urgente de explorar nuevas químicas de baterías que puedan proporcionar más energía a un menor costo (Bacur, 2017). Las baterías de magnesio son otro de los temas de gran importancia; el Mg^{2+} tiene aproximadamente el mismo tamaño que el Li^+ , pero el doble de carga, por lo que puede almacenar más energía. Esta tecnología posee ventajas potenciales sobre las baterías de litio: mayor densidad de energía, mayor estabilidad y menor costo.

Trabajos teóricos (Gileadi, 2011) muestran que los iones metálicos están fuertemente solvatados y cuando se depositan pierden su capa de solvatación, requiriendo para esto superar una energía de activación. En este sentido, junto al grupo del Prof. Dr. Schmickler se ha desarrollado un modelo cuantitativo para el estudio de la deposición de metales, que explica la deposición de iones monovalentes en soluciones acuosas. Una revisión reciente (Oviedo *et al.*, 2016) confirmó que, aparte de nuestro trabajo, no hay un

modelado de la cinética de deposición a escala atómica. A su vez es importante considerar que los iones metálicos multivalentes no pueden acercarse a la superficie del electrodo, a menos que su carga efectiva sea reducida por formación de pares iónicos u otros complejos, ya que sus fuertes capas de solvatación los mantienen alejados de la superficie. Por otra parte, los procesos en disolventes no acuosos han ganado un rol preponderante ya que el agua es estable en una pequeña ventana de potencial, mientras que varios solventes orgánicos tienen un mayor intervalo de estabilidad. De hecho, las baterías de litio no podrían operar en solución acuosa, ya que su potencial es tan alto que descompone al agua. Esto ha aumentado el interés en la teoría de deposición de metales en disolventes no acuosos, que a menudo están acompañados por la formación de complejos y por solvatación mixta, ya que estos disolventes contienen normalmente pequeñas cantidades de agua. Es así que este trabajo pretende contribuir en el estudio para la comprensión de la deposición de estos iones multivalentes, en soluciones no acuosas, con el fin de aportar al desarrollo de estos materiales para baterías.

Consideramos que esta investigación proporcionará una comprensión fundamental de un tipo de proceso que actualmente es foco de investigación en nuestro país, para el estudio y desarrollo de sistemas de acumulación de energía. Debemos destacar que el trabajo es de importancia tecnológica para el desarrollo de baterías, ya que ayuda a comprender el papel de las impurezas presentes en electrodos, en relación con la eficiencia de la deposición y desprendimiento de los metales durante los procesos de carga y descarga en baterías, lo cual es fundamental para el objetivo práctico. En este caso se tiene como objetivo la generación de los conocimientos fundamentales para una gradual y progresiva sustitución de los procesos térmicos convencionales de producción de electricidad por tecnologías más limpias,

no contaminantes del medio ambiente. En este contexto, se ayudaría a transitar el camino que lleve a nuestro país a producir el cambio tecnológico en el área de combustibles.

El trabajo integra la experiencia de los dos grupos de investigación: el grupo de Química Teórica y Computacional del Instituto de Química Aplicada del Litoral, cuya directora es la Dra. Paola Quaino; y uno de los grupos del Instituto de Química Teórica de la Universidad de Ulm, cuyo líder es el Prof. Dr. Wolfgang Schmickler. Entre las labores de los grupos en el tema, se destaca el desarrollo de la Teoría de la Electrocatalisis (Santos *et al.*, 2009), que incluye artículos que extienden el modelo de reacciones de transferencia electrónica a las de iones (Schmickler, 1995, 1996), y otra extensión que combina los potenciales de fuerza media con los resultados de DFT para la interacción electrónica del reactivo con el electrodo (Pecina & Schmickler, 2000). Mediante esta teoría se pueden tratar iones, solvatación y sobrepotencial, permitiendo el cálculo de las energías de activación e incluyendo la reorganización del solvente. Como ejemplo, se investigó la deposición de plata (Pinto *et al.*, 2013; Juárez *et al.*, 2019), y se observó que iones metálicos univalentes pequeños: Ag^+ , Cu^+ , Li^+ , Zn^+ , pueden aproximarse fácilmente al electrodo. Por otro lado, el estudio de iones metálicos divalentes (Pinto *et al.*, 2014; Nazmutdinov *et al.*, 2020; Colombo *et al.*, 2021; Quaino *et al.*, 2021) mostró que son fuertemente repelidos tan pronto como sus capas de solvatación comienzan a romperse.

Desarrollo y actividades

Las actividades desarrolladas durante la movilidad se orientaron directamente a la obtención de conocimientos necesarios para el mejoramiento de la tecnología de baterías

y celdas de combustible. Principalmente, se continuó con la investigación en pos de desarrollar un modelo cuantitativo para un proceso electroquímico de fundamental importancia en baterías: la deposición de metales en distintos solventes, con énfasis en la formación de pares iónicos y otros complejos, con el fin de comprender de qué manera la formación de complejos afecta a la energética de los estados intermediarios, a la energía requerida para alcanzar el sitio de reacción en superficie y a la velocidad de transferencia electrónica.

La Universidad anfitriona dispone de acceso al clúster Justus, con alta capacidad de cómputo, esto permitió la realización de los cálculos químico-cuánticos extensos basados en la Teoría del Funcional de Densidad (DFT), que son requeridos para el desarrollo de la investigación. Así, las actividades principales desarrolladas en la estancia incluyeron:

- 1) Estudio de deposición del metal mediante cálculos teóricos cuánticos por DFT. Estudio de cambios geométricos, energéticos y electrónicos producidos en el proceso de deposición del ion metálico en superficie.

Los cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) se realizaron mediante el código VASP (Kresse, 1995, 1996a, 1996b). Los electrones internos se mantuvieron inmóviles y fueron reemplazados por pseudo-potenciales generados por el método de onda plana aumentada, y los electrones de valencia fueron tratados por medio de un conjunto de bases de ondas planas. Dentro de la aproximación de gradiente generalizado fue empleado el funcional de intercambio y correlación PBE. La celda fue modelada empleando condiciones periódicas de contorno en x e y , y para describirlo correctamente se impuso una separación

suficiente en las direcciones no periódicas. Para ello, inicialmente fue optimizada la magnitud del parámetro de celda, seleccionando como óptima aquella de menor energía.

2) Cálculos DFT para describir las interacciones ion-metal.

Adicionalmente, con el objetivo de obtener parámetros de interacción entre la superficie metálica y el ion, se modeló el sistema y se realizaron cálculos con el código SIESTA (Soler, 2002), un software basado también en DFT, pero que utiliza orbitales localizados.

3) Determinaciones de pmf y cinética de deposición.

Se investigó el efecto de un solvente no acuoso (tetrahidrofurano) en la deposición del ion metálico mediante simulaciones de dinámica molecular clásica empleando el código de acceso público Lammmps (Plimpton, 1995) y se evaluaron las propiedades de deposición de los iones solvatados en superficies metálicas.

Los resultados logrados se encuentran en proceso de análisis y las actividades continúan a la distancia, entre el grupo argentino y el grupo alemán, y se prevé aplicar la Teoría de la Electrocatálisis para la evaluación de la actividad electrocatalítica de las superficies electródicas y el efecto del solvente.

Referencias bibliográficas

BUCUR, C. B. (2017). *Challenges of a rechargeable magnesium battery: a guide to the viability of this post lithium-ion battery*. Springer.

- COLOMBO, E., BELLETTI, G. D., FONSECA, S., PINTO, L. M., JUAREZ, M. F., NAZMUTDINOV, R., SANTOS, E., SCHMICKLER, W. y QUAINO, P. (2021). Copper Deposition from Chloride-Containing Aqueous Solutions: Catalysis and the Role of the Water Structure. *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(3), 1811-1818.
- GILEADI, E. (2011). The enigma of metal deposition. *Journal of electroanalytical chemistry*, 660(2), 247-253.
- JUAREZ, F., QUAINO, P., COLOMBO, E., SANTOS, E., JACKSON, M. N. y SCHMICKLER, W. (2019). Why are trace amounts of chloride so highly surface-active? *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 847, 113128.
- KRESSE, G. y HAFNER, J. (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Physical review B*, 47(1), 558.
- KRESSE, G. y FURTHMÜLLER, J. (1996a). Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational materials science*, 6(1), 15-50.
- KRESSE, G. y FURTHMÜLLER, J. (1996b). Efficient iterative schemes for ab initio total energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical review B*, 54(16), 11169.
- NAZMUTDINOV, R., QUAINO, P., COLOMBO, E., SANTOS, E. y SCHMICKLER, W. (2020). A model for the effect of ion pairing on an outer sphere electron transfer. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(25), 13923-13929.
- OVIDO, O. A., REINAUDI, L., GARCÍA, S. G. y LEIVA, E. P. M. (2016). Underpotential deposition. *Monograph in electrochemistry. Springer, Cham*, 1-15.
- PAUNOVIC, M. y SCHLESINGER, M. (2006). *Fundamentals of electrochemical deposition*. John Wiley & Sons.
- PECINA, O. y SCHMICKLER, W. (2000). The solvent influence on the electrochemical transfer of divalent ions. *Chemical Physics*, 252(3), 349-357.

- PINTO, L. M., SPOHR, E., QUAINO, P., SANTOS, E. y SCHMICKLER, W. (2013). Why silver deposition is so fast: Solving the enigma of metal deposition. *Angewandte Chemie International Edition*, 52(30), 7883-7885.
- PINTO, L. M., QUAINO, P., SANTOS, E. y SCHMICKLER, W. (2014). On the electrochemical deposition and dissolution of divalent metal ions. *ChemPhysChem*, 15(1), 132-138.
- PLIMPTON, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*, 117(1), 1-19.
- QUAINO, P., COLOMBO, E., JUAREZ, F., SANTOS, E., BELLETTI, G., GROSS, A. y SCHMICKLER, W. (2021). On the first step in zinc deposition—A case of nonlinear coupling with the solvent. *Electrochemistry Communications*, 122, 106876.
- SANTOS, E., LUNDIN, A., PÖTTING, K., QUAINO, P. y SCHMICKLER, W. (2009). Model for the electrocatalysis of hydrogen evolution. *Physical Review B*, 79(23), 235436.
- SCHMICKLER, W. (1995). A unified model for electrochemical electron and ion transfer reactions. *Chemical physics letters*, 237(1-2), 152-160.
- SCHMICKLER, W. (1996). Electron and ion transfer reactions on metal electrodes. *Electrochimica acta*, 41(14), 2329-2338.
- SOLER, J. M., ARTACHO, E., GALE, J. D., GARCÍA, A., JUNQUERA, J., ORDEJÓN, P. y SÁNCHEZ-PORTAL, D. (2002). The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(11), 2745.