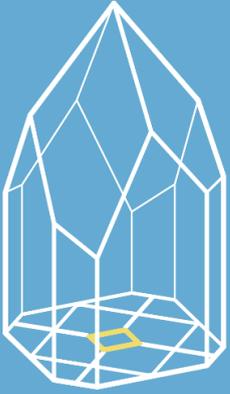


LIBRO DE RESÚMENES



XIX REUNIÓN ANUAL
ASOCIACIÓN ARGENTINA
DE CRISTALOGRAFÍA

La Plata/Berisso
2024

Libro de resúmenes de la XIX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía. La Plata/Berisso 2024.

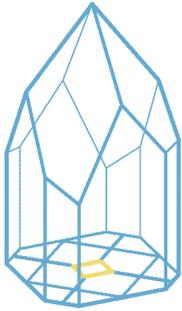
Compilado por: María Soledad Legnoverde, Anabella Mocciaro y Diego Richard
Diseño del logo de la reunión: Mariel Anthonioz-Blanc

Libro de Resúmenes de la XIX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía /
Compilación de Diego Richard ; Anabella Mocciaro ; María Soledad Legnoverde. - 1a ed
compendiada. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata. Facultad de Ciencias Exactas, 2024.
Libro digital, PDF

Archivo Digital: online
ISBN 978-950-34-2455-1

1. Cristalografía.
CDD 548

Libro de resúmenes



XIX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía
6 al 8 de noviembre de 2024 - Berisso

XII Taller de la Asociación Argentina de Cristalografía
Sesión especial 8 de noviembre de 2024 - Berisso

XV Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía
11 al 15 de noviembre de 2024 - La Plata

Organizan:



Y-TEC

Patrocinan:



Auspician:





Asociación Argentina de Cristalografía

Comisión Directiva

Presidente: Dr. Sebastián **Klinke**

Vice-presidente: Dr. Carlos A. **López**

Secretario: Dr. Martín E. **Saleta**

Secretaria segunda: Dra. Clarisa E. **Álvarez**

Tesorera: Ing. Marta M. **Dailoff**

Pro-tesorera: Dra. Valeria C. **Fuertes**

Vocales titulares: Dr. Pablo M. **Botta**

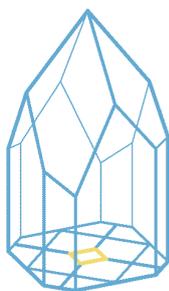
Lic. Susana **Conconi**

Ing. María A. **Miranda**

Dra. Vanina G. **Franco**

Vocales suplentes: Dra. María C. **Bernini**

Dr. Félix M. **Ferroni**



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

Comité organizador local

Susana **Conconi** (Chair), CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)
Gustavo **Echeverría**, IFLP (CONICET-UNLP)
Martín **Mizrahi**, INIFTA (CONICET-UNLP)
Daniel **Poiré**, CIG (CONICET-UNLP)
Diego **Richard**, CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)
Anabella **Mocciaro**, CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)
Ana **Bianchi**, IFLP (CONICET-UNLP)
Verónica **Ferraresi Curotto**, IFLP (CONICET-UNLP)
María Ángela **Álvarez Manso**, CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)
Karina **Irvicelli**, Y-TEC
María Soledad **Legnoverde**, CINDECA (CONICET-UNLP-CICPBA)

Comité científico

Daniel **Vega** (Chair), CAC (CONICET-CNEA)
Oscar **Piro**, IFLP (CONICET-UNLP)
Martín **Saleta**, CAB (CONICET-CNEA)
Dina **Tobía**, CAB (CONICET-CNEA)
Florencia **Di Salvo**, INQUIMAE (CONICET-UBA)
Marta **Dailoff**, CCT Bahía Blanca (CONICET)
Carlos **López**, INTEQUI (CONICET-UNSL)
Valeria C. **Fuertes**, INFIQC (CONICET-UNC)
Clarisa E. **Álvarez**, CEFOBI (CONICET-UNR)
Pablo **Botta**, INTEMA (CONICET-UNMDP)
Alberto **Caneiro**, Y-TEC

Colaboradores

Gustavo Suárez, CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)
Nicolás M. Rendtorff, CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)
Matias Gauna, CETMIC (CONICET-UNLP-CICPBA)

ÍNDICE

BIENVENIDA	8
PROGRAMA	9
SEDES	12
CONFERENCIAS PLENARIAS Y SEMIPLENARIAS	13
CONTRIBUCIONES ORALES	24
CONTRIBUCIONES MURALES	37
XII TALLER DE LA AACR	117
ÍNDICE DE AUTORXS	127

BIENVENIDA

El Comité organizador les da hoy la bienvenida a nuestra XIX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía, esperando resulte una oportunidad provechosa para continuar esta buena tradición donde nos encontramos e intercambiamos la amplitud de saberes nucleados en torno a la Cristalografía.

Este no es un año más para nuestra querida Asociación, sino que se cumplen 20 años de aquel primer encuentro del 2004 en Villa Giardino. Mirando atrás, sólo podemos dar gracias por estos 20 años, en que hemos crecido como comunidad, en número pero también podemos recoger los frutos de tantos intercambios enriquecedores del saber científico, tantos jóvenes formados en nuestras Escuelas de Cristalografía, tantas oportunidades de escuchar a destacados científicos internacionales.

También nos surge recordar con especial agradecimiento a los pioneros de nuestra Asociación que nos dejaron la tarea de continuar sus esfuerzos iniciales para que nuestra comunidad tenga un espacio de encuentro con identidad propia. En nuestra comunidad platense, no podemos dejar de mencionar a quien fuera pionera de la Asociación y educadora generosa, Graciela Punte, homenajeada en nuestra Reunión con un premio que lleva su nombre en su primera edición.

En esta oportunidad la Reunión se realizará en Y-TEC, en la ciudad de Berisso, e incluirá más de 100 contribuciones entre conferencias plenarias, semiplenarias, contribuciones orales y murales. Además, teniendo en cuenta la sede que nos albergará este año, consideramos oportuno tener una jornada especial para discutir los avances en técnicas cristalográficas para el estudio de materiales para la energía en el XII Taller de la Asociación. Luego, del 11 al 14 de noviembre continuaremos con la XV Escuela de la Asociación en la ciudad de La Plata, que este año tratará sobre cristalografía básica y técnicas basadas en rayos X (difracción, dispersión y absorción).

El evento de este año no podría haberse realizado sin el patrocinio de las diversas instituciones y empresas que decidieron acompañarnos. A todas ellas nuestro profundo agradecimiento.

Por último, cabe señalar que siendo La Plata un Polo científico con presencia universitaria y científica diversa y de gran nivel científico, para la realización de la Reunión hemos participado en forma conjunta integrantes de varios organismos de la región, lo cual refleja la transversalidad de la cristalografía a las diversas disciplinas que los mismos involucran: el Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA, CONICET-UNLP-CICPBA), el Centro de Investigaciones Geológicas (CIG, CONICET-UNLP), el Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CONICET-UNLP), el Instituto de Física La Plata (IFLP, CONICET-UNLP), el Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC, CONICET-UNLP-CICPBA) y la ya mencionada empresa Y-TEC (YPF Tecnología S.A.).

Finalmente, esperamos disfruten este espacio de encuentro.

Comité Organizador

PROGRAMA

XIX Reunión Anual de la AACr y XII Taller de la AACr

MIÉRCOLES 6 DE NOVIEMBRE	
8:00-8:30	ACREDITACIÓN
8:30-9:00	APERTURA
9:00-10:00	Conferencia plenaria 1: J. Ellena, CRYSTALLIZING HEALTH: UNLOCKING THE ELECTRON DENSITY DISTRIBUTION IN PHARMACEUTICAL CO-CRYSTALS
10:00-10:15	Contribución Oral 1: V. Contini et al., NUEVOS CODOPANTES PARA LA ESTABILIZACIÓN DEL POLIMORFO CÚBICO EN CERÁMICOS DE CIRCONIA ESTABILIZADA CON ESCANDIA (ScSZ)
10:15-10:30	Contribución Oral 2: I.N. Arceo et al., SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN EMPLEANDO LA PLATAFORMA $[\text{Ir}(\text{ppy})_2]^+$ Y LIGANDOS PSEUDOHALÓGENO
10:30-10:45	Contribución Oral 3: M.E. Saleta et al., SISTEMA KBr-KCl: UN EJEMPLO PEDAGÓGICO PARA LA ENSEÑANZA EXPERIMENTAL DE LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X
10:45-11:15	CAFÉ
11:15-11:45	<i>Conferencia Semiplenaria 1:</i> M. Ceolín, ALGUNAS APLICACIONES DE RAYOS-X COHERENTES AL ESTUDIO DE MATERIALES BLANDOS
11:45-12:15	<i>Conferencia Semiplenaria 2:</i> R.D. Sánchez, PROPIEDADES DE UN LÍQUIDO DE FERMÍ EN DICALCOGENUROS Y PEROVSKITAS MULTIFERROICAS DE TIERRAS RARAS Y METALES DE TRANSICIÓN
12:15-12:30	<i>Contribución Oral 4:</i> M. Vivas Arellano et al., SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LAS PEROVSKITAS $\text{TmCr}_x\text{Co}_{1-x}\text{O}_3$ ($0 < x < 1$)
12:30-12:45	<i>Contribución Oral 5:</i> S. Terny et al., EVALUACIÓN DEL EFECTO DEL B_2O_3 SOBRE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELÉCTRICAS DEL $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$
12:45-13:00	<i>Contribución Oral 6:</i> V.D. Ponce et al., SÍNTESIS HIDROTERMAL VS MOLIENDA ASISTIDA: ESTRUCTURAS BASADAS EN CdWO_4 DOPADAS CON Na^+ y Eu^{3+} , ANÁLISIS ESTRUCTURAL, LUMINISCENCIA Y SENSADO QUÍMICO
13:00-14:30	LUNCH DE BIENVENIDA
14:30-15:30	<i>Conferencia Plenaria 2:</i> A.L. Soldati, POLIMORFISMO EN CaCO_3 : DE LA BIOMINERALIZACIÓN A LA NANOMEDICINA
15:30-16:00	<i>Conferencia Semiplenaria 3:</i> D.R. Vega y D.G. Lamas, A 20 AÑOS DE LA FUNDACIÓN DE LA ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA
16:00-17:00	SESIÓN DE POSTERS Y CAFÉ

JUEVES 7 DE NOVIEMBRE	
8:30-9:00	ACREDITACIÓN
9:00-10:00	<i>Conferencia Plenaria 3:</i> M.D. Costabel, SYNERGY BETWEEN CRYSTALLOGRAPHY AND COMPUTATIONAL SIMULATIONS. THE STRUCTURE-FUNCTION RELATIONSHIP OF A VIRAL CAPSID AS AN INTERESTING EXAMPLE
10:00-10:15	<i>Contribución Oral 7:</i> E. Gutiérrez et al., CRYSTAL ENGINEERING IN THE RATIONAL DESIGN OF PHARMACEUTICAL MATERIALS: REPORT OF A NEW MEBENDAZOLIUM TOSYLATE SALT
10:15-10:30	<i>Contribución Oral 8:</i> M.A. Franco et al., EVOLUCIÓN DEL CRECIMIENTO DE ÓXIDOS POR OXIDACIÓN CONTROLADA A TEMPERATURA AMBIENTE SOBRE SUSTRATOS DE ALPACA
10:30-10:45	<i>Contribución Oral 9:</i> K.N. Varela et al. IDENTIFICACIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS IGUALES O CUASI IGUALES MEDIANTE EL CÁLCULO DE DISTANCIAS Y ÁNGULOS. UNA HERRAMIENTA FUNDAMENTAL EN LA PREDICCIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS
10:45-11:15	CAFÉ
11:15-11:45	<i>Conferencia Semiplenaria 4:</i> M.C. Fuertes, REFLECTOMETRÍA DE RAYOS X CON CONTROL AMBIENTAL: UNA TÉCNICA VERSÁTIL PARA ESTUDIAR LA ESTRUCTURA DE PELÍCULAS DELGADAS POROSAS
11:45-12:00	<i>Contribución Oral 10:</i> F.A. Gómez Albarracín y H.D. Rosales, FASES TOPOLÓGICAS EN SISTEMAS MAGNÉTICOS
12:00-12:30	Empresa Analytical Technologies - Representante Bruker
12:30-13:30	ALMUERZO
13:30-14:30	<i>Conferencia Plenaria 4:</i> G. Aurelio, CRISTALOGRAFÍA USANDO HACES DE NEUTRONES
14:30-15:00	<i>Conferencia Semiplenaria 5:</i> J. R. Santisteban, EL LABORATORIO ARGENTINO DE HACES DE NEUTRONES: TÉCNICAS NEUTRÓNICAS PARA ARGENTINA Y LATINOAMÉRICA
15:00-15:45	SESIÓN DE POSTERS Y CAFÉ
15:45-17:15	ASAMBLEA ORDINARIA AACR
20:30	CENA DE CAMARADERÍA

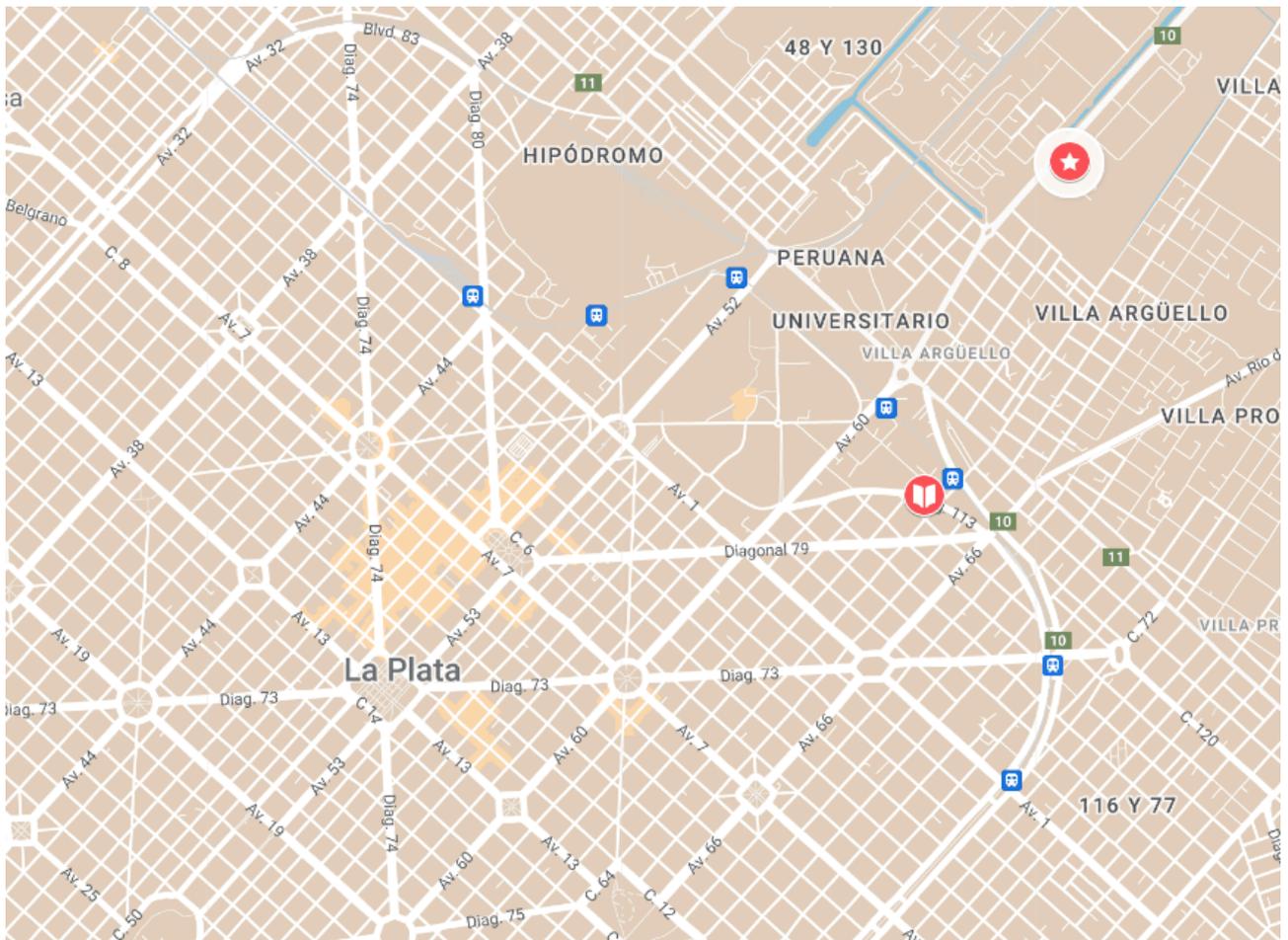
VIERNES 8 DE NOVIEMBRE

XI Taller de la AACr "Avances en técnicas cristalográficas para el estudio de materiales para la energía"	8:30-9:00	ACREDITACIÓN Y CAFÉ
	9:00-9:30	<i>Conferencia Semiplenaria T1:</i> M.A. Frechero, CAMINO A COMPRENDER LAS CLAVES PARA LA ESTABILIZACIÓN DE LAS FASES CONDUCTORAS EN SÓLIDOS POLICRISTALINOS
	9:30-9:45	<i>Contribución Oral T1:</i> J.E. Vega Castillo et al., RECUBRIMIENTOS DE NÍQUEL RANEY COMO ELECTRODOS PARA ELECTRÓLISIS ALCALINA
	9:45-10:00	<i>Contribución Oral T2:</i> D.H. Lizarraga et al., DISEÑO, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CONDUCTORES MIXTOS BASADOS EN Sr11Mo4O23 DOPADOS CON Fe Y Co
	10:00-10:15	DISCUSIÓN DEL BLOQUE
	10:30-11:00	<i>Conferencia Semiplenaria T2:</i> M.J. Bentabol, DESCUBRIENDO LAS ARCILLAS: UN VIAJE DESDE LA TIERRA HASTA LA INNOVACIÓN
	11:00-11:15	<i>Contribución Oral T3:</i> E. Camilión et al., ESTIMACIÓN DE COMPOSICIÓN MINERAL EN ROCAS SEDIMENTARIAS A PARTIR DE ELEMENTOS QUÍMICOS Y REDES NEURONALES
	11:15-11:30	<i>Contribución Oral T4:</i> T. Muñoz et al., CARACTERIZACIÓN DE POLITIPOS DE ILLITA EN LA FORMACIÓN VACA MUERTA: IMPLICANCIAS EN EL ORIGEN Y DIAGÉNESIS
	11:30-11:45	DISCUSIÓN DEL BLOQUE
	12:00-12:30	<i>Conferencia Semiplenaria T3:</i> J.M. Ramallo López, ESTUDIOS OPERANDO CON TÉCNICAS DE LUZ SINCROTRÓN DE MATERIALES CATÓDICOS PARA LA NUEVA GENERACIÓN DE BATERÍAS DE ION-LI
	12:30-12:45	<i>Contribución Oral T5:</i> P.C. Rivas Rojas et al., TRANSFORMACIÓN DE FASE SCHEELITA-PEROVSKITA CON EXSOLUCIÓN DE NANOPARTÍCULAS EN MATERIALES $Sr_{(1-\alpha)}Mo_{(1-\beta)}Ni_{\beta}O_{3-6}$ COMO ÁNODOS PARA SOFC
	12:45-13:00	<i>Contribución Oral T6:</i> M.A. Salguero Salas et al., NANOESTRUCTURAS DE HIDRÓXIDOS BIMETÁLICOS DE INTERÉS EN DISPOSITIVOS DE ENERGÍA
	13:00-13:15	DISCUSIÓN DEL BLOQUE
	13:15-14:00	CIERRE Y ALMUERZO
	14:00-14:30	VISITA A YTEC
	14:30-15:00	Empresa InBox: J.P. González, APLICACIONES Y RETOS DE LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X EN LA INVESTIGACIÓN DE MATERIALES AVANZADOS
	15:00-15:30	<i>Conferencia Semiplenaria 6:</i> C. Miranda, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES OXÍDICOS: PEROVSKITAS DISEÑADAS COMO CONDUCTORES IÓNICOS ELECTRÓNICOS (Ganador Premio G. Punte)
15:30-15:45	<i>Contribución Oral 11:</i> L. Toscani et al., COMISIÓN DEGÉNERO Y NO DISCRIMINACIÓN DE LA AACr RESULTADOS Y PERSPECTIVAS A 5 AÑOS DE SU CREACIÓN	
15:45-16:00	<i>Contribución Oral 12:</i> G.C. Lavorato et al., NANOPARTÍCULAS HÍBRIDAS EPITAXIALES CON ESTRUCTURA ESPINELA: ESTABILIDAD Y GRADIENTES DE COMPOSICIÓN CATIONICA	
16:00-16:30	CIERRE - CAFÉ DE DESPEDIDA	

SEDES

La XIX Reunión Anual de la AACr y el XII Taller de la AACr se desarrollarán del 6 al 8 de noviembre de 2024 en YPF Tecnología (Y-TEC), en Av. del Petróleo Argentino 900-1198, Berisso, Provincia de Buenos Aires.

Por otro lado, la XV Escuela de la de la AACr se realizará del 11 al 15 de noviembre de 2024 en el Instituto de Física La Plata (IFLP, CONICET-UNLP), en Diagonal 113 entre 63 y 64, La Plata, Provincia de Buenos Aires.



Referencias del mapa:

-  Sede de la Reunión y el Taller
-  Sede de la Escuela

CONFERENCIAS PLENARIAS Y SEMIPLENARIAS



CRYSTALLIZING HEALTH: UNLOCKING THE ELECTRON DENSITY DISTRIBUTION IN PHARMACEUTICAL CO-CRYSTALS

J. Ellena*

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, 13566-590, São Carlos, SP, Brazil

**javiere@ifsc.usp.br*

Palabras claves: QUANTUM CRYSTALLOGRAPHY; COCRYSTAL; TUBERCULOSIS; PERIODIC DFT CALCULATIONS

Analysing the electron density distribution of pharmaceutical co-crystals provides detailed information on the bonding and non-bonding interactions between molecules, which are crucial for understanding its stability, solubility, and bioavailability properties. Examining how electrons are distributed and how they influence intermolecular interactions is an important step towards the optimization of the physical properties of the cocrystal, leading to better drug design and performance. These applications could lead to more effective and reliable treatments for patients, especially in regions where drug stability is a significant concern due to environmental factors. As a case of application we will discuss the experimental and theoretical electron density distribution analyses of the drug-drug cocrystal formed by the antifungal prodrug 5-Fluorocytosine and the tuberculostatic drug Isoniazid. This Drug-drug cocrystal was designed for the treatment of cases of coexistence of invasive fungal infections and tuberculosis, mainly in immunocompromised patients. It shows superior phase stability properties against moisture which is beneficial for storage and transportation in tropical climates, extending in this way its shelf life so it could be considered as a potential candidate for the treatment of concomitant fungal infections, tuberculosis, and cancer.

The recognition and manipulation of the supramolecular synthons are the key aspects to successfully design these kinds of solid forms. However, only few cases of drug-drug cocrystals have been reported in the literature because drug-drug cocrystals are considered as fixed-dose combination products, and hence, the active pharmaceutical ingredients involved need to be those which are usually co-administered, also presenting proper dosage.

Topological analyses of the charge density of this cocrystal were performed for both experimental and theoretical data (periodic and gas phase calculations), indicating good agreement between experiment and theory. The comparison with gas phase calculations enabled the evaluation of the charge redistribution upon cocrystallization as well as the effect of the intermolecular interactions. In this manner, it was possible to evaluate the variations in bond distances and electron density at the bonds involved in the intermolecular heterosynthon. Through the total charge of each molecule in the cocrystal, it was also possible to have insights on the charge redistribution when both molecules crystallize together. Electrostatic potential maps calculations will also be discussed. HAR partition model for 5FC:INH were also calculated using ORCA 5.0, at the M062-X/def2-TZVP level of theory, assuming two asymmetric units in the refinement as means to take into account the F...F and F...H contacts.

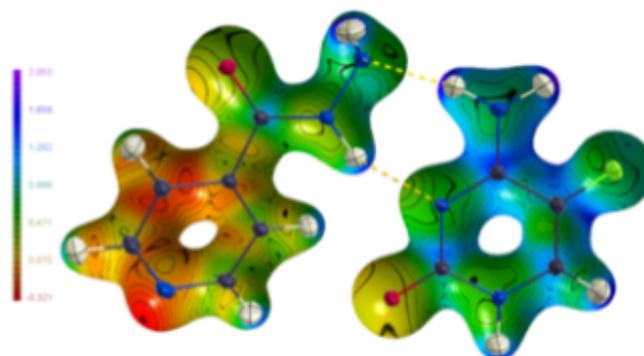


Figure 1. Electrostatic potential mapping for experimental data [?].

[1] C.B. Pinto et al., *Cryst. Growth Des.* 24 (2024) 5614-5626. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.4c00401>

The authors are grateful to the Brazilian funding agencies FAPESP (2013/07581-9, 2016/08823-4, 2017/15850-0 and 2023/10889-7), CNPq (312505/2021-3) and CAPES (Finance code 001).



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



ALGUNAS APLICACIONES DE RAYOS-X COHERENTES AL ESTUDIO DE MATERIALES BLANDOS

M. Ceolín*

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, UNLP/CONICET

**mrceolin@gmail.com*

Palabras claves: LUZ SINCROTRÓN; COHERENCIA; DINÁMICA ESTRUCTURAL; XPCS

Con el advenimiento de las fuentes de luz Sincrotrón de 4ta generación [1-3], el volumen de coherencia del haz de luz y, consecuentemente, la componente coherente de la radiación sincrotrón ha sido cada vez más accesible y práctica.

De esta forma, la coherencia permite el desarrollo y aplicación de novedosas técnicas. En particular, la combinación de radiación coherente y detectores de alta velocidad de *read-out* permite acceder a información sobre la dinámica de la estructura de los materiales, incorporando una nueva dimensión al espectro de técnicas de caracterización.

En esta presentación haremos una breve descripción de la técnica de Espectroscopia de Correlación de Fotones de Rayos-X (XPCS), su relación con la componente coherente de la luz sincrotrón, la información accesible a partir de ella y algunos resultados recientemente obtenidos en el acelerador SIRIUS de Campinas utilizando esta técnica.

[1] <https://lnls.cnpem.br/sirius-en/>

[2] <https://www.maxiv.lu.se/>

[3] <https://www.esrf.fr/home.html>



**PROPIEDADES DE UN LÍQUIDO DE FERMI EN DICALCOGENUROS Y PEROVSKITAS
MULTIFERROICAS DE TIERRAS RARAS Y METALES DE TRANSICIÓN**

F.E. Lurgo¹, M. Vivas Arellano², J. Lohr³, J. De Paoli², R.E. Carbonio², D. Velazquez Rodriguez¹, G.A. Muñoz Medina³, M. Saleta¹, R.D. Sánchez^{1*}

¹Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (INN), CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica and Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Av. Bustillo 9500, 8400 San Carlos de Bariloche (RN)

²INFIQC (CONICET-UNC), Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Haya de la Torre Esq. Medina Allende, Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba

³Comisión Nacional de Energía Atómica, Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones. Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500 R8402AGP, S. C. de Bariloche

*rodolfosanchez@cnea.gob.ar

Palabras claves: DICALCOGENUROS; PEROVSKITAS; LÍQUIDO DE FERMI; MULTIFERROICOS; MAGNETISMO

Estudiamos diferentes familias de aleaciones de dicalcogenuros, $Rh_{1-x}Ir_xTe_2$ y $Pd_{1-x}M_xTe_2$ ($M=Ir,Rh$) [1,2], y encontramos que estas aleaciones presentan características de un líquido de Fermi. Entre las características que observamos podemos mencionar que la susceptibilidad magnética tiene una componente de Pauli, independiente de temperatura, cuyos valores superan los esperados para la susceptibilidad magnética de un gas de Fermi (electrones libres sin interacciones). En un modelo de Líquido de Fermi (electrones con interacciones) se puede estimar la masa efectiva de los portadores. Otra característica observada es la dependencia cuadrática con la temperatura de la resistividad eléctrica, además del término lineal característico de los metales. Otra característica metálica observada, es el término lineal en temperatura del coeficiente Seebeck que puede ser descrito por la ecuación de Mott. La resistividad tiene un comportamiento parabólico con x , característico de las aleaciones con desorden.

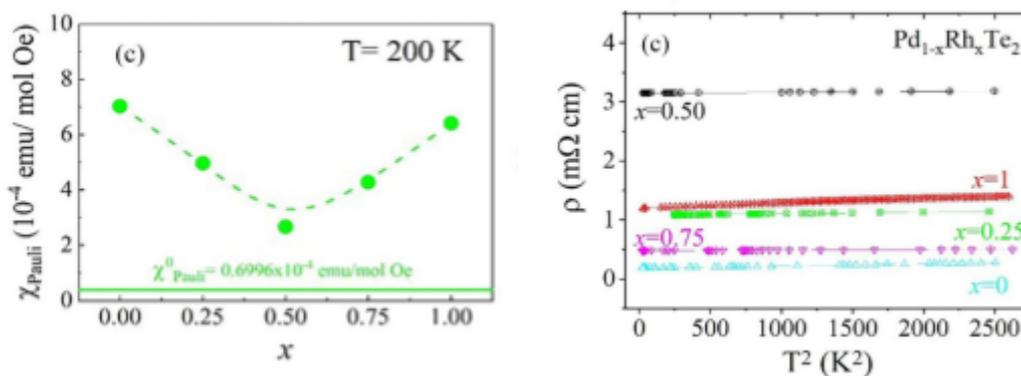


Figura 1. Características de líquido de Fermi en la aleación $Pd_{1-x}Rh_xTe_2$. Izq. Susceptibilidad magnética de Pauli para diferentes composiciones, los valores son mayores que los esperados para el caso de electrones libres (sin interacciones). Der. Dependencia cuadrática de la temperatura de la resistividad eléctrica.

Otra familia de compuestos corresponde a las perovskitas del tipo $RM_{1-x}M'_xO_3$ (con R=tierra rara, y M y M' , metales de transición) que tienen propiedades multiferroicas [3].

[1] F.E. Lurgo, F. Pomiro, R.E. Carbonio and R.D. Sánchez. Phys. Rev. B (2022) 104104.

[2] F.E. Lurgo, R.E. Carbonio and R.D. Sánchez. Phys. Rev. B 109 (2024) 094104.

[3] J. Lohr et al., Phys. Rev. B 98 (2018) 134405.



POLIMORFISMO EN CaCO_3 : DE LA BIOMINERALIZACIÓN A LA NANOMEDICINA

A.L. Soldati^{1,2*}, M.M. Gonzalez^{1,2,3}, P.E. Di Prátula¹, D.E. Tolabin⁴, S.G. Suárez¹, D.G. Lamas^{3,5}

¹Departamento Ciclotrón y Radiofarmacia, Centro Integral de Medicina Nuclear y Radioterapia de Bariloche, INTECNUS- CNEA, San Carlos de Bariloche

²Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Nodo Bariloche, Av. Bustillo 9500, (8400) S.C. de Bariloche (RN)

³Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM, San Martín, Pcia. de Buenos Aires

⁴Departamento de Radioterapia, Centro Integral de Medicina Nuclear y Radioterapia de Bariloche, INTECNUS- CNEA, San Carlos de Bariloche

⁵Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Instituto de Tecnología Emergentes y ciencia Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, San Martín Pcia. de Buenos Aires

*analia.soldati@intecnus.org.ar

Palabras claves: CARBONATO DE CALCIO; POLIMORFISMO; VATERITA; NANOPARTÍCULAS

El carbonato calcio (CaCO_3), un material clásico para observar polimorfismo, viene siendo utilizado desde hace siglos para aplicaciones industriales y como componente de muchos materiales. Recientemente, el tema de su capacidad de transformación de un polimorfo a otro bajo determinadas condiciones (fisiológicas o inducidas externamente) ha tomado un giro interesante: se ha descubierto que esta propiedad puede utilizarse para innovar en el campo de la medicina. Sumado a sus propiedades de alta estabilidad en fluidos biológicos, biocompatibilidad y baja toxicidad, el CaCO_3 está siendo estudiado para aplicaciones como el transporte y la liberación de fármacos en el cuerpo humano.

En fase sólida el CaCO_3 existe tanto amorfo como cristalino, y puede presentarse en formas hidratadas y no hidratadas. Dentro de éstas últimas se hallan los tres polimorfos cristalinos más conocidos: calcita, aragonita y vaterita. A temperatura ambiente y presión atmosférica, la vaterita es de las tres la termodinámicamente más inestable, seguida por la aragonita y la calcita. Con respecto a la estructura, la aragonita pertenece al sistema cristalino ortorrómbico y la calcita al trigonal. La vaterita ha sido históricamente más controversial, aunque actualmente se ha llegado al consenso que pertenece al sistema hexagonal. Por otro lado, el hábito cristalino depende de las condiciones de crecimiento del cristal, y pueden existir varios hábitos distintos para un mismo polimorfo. La calcita, por ejemplo, suele aparecer como cristales romboédricos y prismáticos, la aragonita suele formar cristales prismáticos alargados o aciculares, y la vaterita se reconoce por sus granos policristalinos, esféricos, lenticulares o framboidales, entre otros.

El estudio de procesos de biomineralización ha revelado que, bajo ciertas condiciones ambientales, la vaterita aparece como un intermediario entre la primera precipitación biológica del carbonato de calcio amorfo y la aparición de las fases más estables calcita y/o aragonita. Este efecto también ha sido observado en vaterita sintetizada en laboratorio. En ambos casos, la retención del polimorfo metaestable parece estar relacionada a la conservación de un tamaño de cristal nanométrico, en concurrencia con procesos de disolución y reprecipitación, crecimiento de cristal y aglomeración.

Siendo un material mucho más poroso y de mayor área superficial que los polimorfos aragonita y calcita, la vaterita sintética se estabiliza en aglomerados policristalinos micrométricos, presentando cristalitas que rondan los 100 nm. La morfología de los aglomerados, el tamaño de partícula alcanzado y la pureza polimórfica obtenida por distintas rutas de síntesis son muy dependientes de las condiciones en las que ocurre la precipitación, como la temperatura, el pH, la velocidad de agitación de la solución, el orden de adición de los precursores y la utilización de aditivos. Asimismo, estudios recientes han demostrado que las partículas de vaterita pueden ser cargadas con metales, proteínas, péptidos, macromoléculas, y drogas como insulina, antibióticos, anticancerígenos y fotosensibilizadores, entre otras. La transformación de fase a calcita permite luego la liberación controlada de la droga en los tejidos blanco. En este trabajo se expondrá un resumen de estos avances y las perspectivas a futuro en el área de la nanomedicina.



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



A 20 AÑOS DE LA FUNDACIÓN DE LA ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

D.R. Vega^{1*} y D.G. Lamas^{2**}

¹*Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA. San Martín, Pcia. de Buenos Aires*

²*Laboratorio de Cristalografía Aplicada, ITECA, UNSAM-CONICET. San Martín, Pcia. de Buenos Aires*

danielvega@cnea.gob.ar*; *dlamas@unsam.edu.ar*

Palabras claves: ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA; AACR; CRISTALOGRAFÍA

Si bien nuestro país tiene una vasta historia en Cristalografía y forma parte de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) desde hace más de 60 años, la formación de una asociación nacional fue mucho más reciente. Argentina se sumó a la IUCr en 1960, por iniciativa del Premio Nobel Bernardo Houssay, siendo el CONICET la institución adherente que integra dicho organismo en nombre de nuestro país. En ese momento se creó el Comité Argentino de Cristalografía, elegido por las autoridades de CONICET para la representación ante la IUCr, que organizaba actividades académicas en el país, como cursos y congresos, y cuyos miembros se renovaban periódicamente. Si bien así se fue formando una comunidad, por varias décadas no surgió la idea de formar una asociación. La iniciativa nació principalmente por propuesta de la Dra. Iris Torriani, destacada cristalógrafa argentina radicada en Brasil, que dio un gran impulso a la Cristalografía en América Latina cuando fue elegida miembro del Comité Ejecutivo de la IUCr en 2002 (más tarde fue vicepresidente). En ese año, la Dra. Torriani conversó con varios colegas argentinos, incluyendo a los autores de este trabajo, y se empezó a gestar el nacimiento de la asociación.

Luego de 2 años de consultas a distintas comunidades en diversos congresos nacionales, se organizó el “Taller Nacional de Cristalografía” en Villa Giardino, Provincia de Córdoba, los días 30 y 31 de octubre de 2004, como evento satélite del IX Seminario Latinoamericano de Análisis por Técnicas de Rayos X (SARX 2004). En este taller, representantes de grupos de todo el país expusieron sobre sus proyectos de investigación y equipamiento disponible y, al cierre del primer día, se fundó la Asociación Argentina de Cristalografía (AACr). Se eligió al Dr. Ricardo Baggio como el primer presidente de la AACr y a la Dra. Graciela Punte como vicepresidente.

Desde 2005, la AACr realiza reuniones todos los años (la única excepción fue el 2020, por la pandemia de COVID 19) recorriendo distintas provincias del país, en las que sus socios comparten sus investigaciones, a la vez que se realiza una asamblea para organizar actividades futuras. Desde el año 2009 se organiza la “Escuela Anual de la AACr” como satélite de la reunión anual y, a partir de 2012, también un taller dedicado a alguna temática particular como técnicas de luz sincrotrón, técnicas neutrónicas, relación con la industria, etc.

En el décimo aniversario de la AACr, que coincidió con el Año Internacional de la Cristalografía (2014), se inició un intenso trabajo de divulgación de la Cristalografía y de promoción de vocaciones científicas, con una fuerte interacción con la comunidad educativa de todos los niveles, especialmente secundario. Ese año se lanzó el “Concurso Nacional de Crecimiento de Cristales para Colegios Secundarios” que se continuó realizando anualmente hasta hoy, junto con talleres de capacitación sobre Cristalografía y Crecimiento de Cristales para docentes de todos los niveles educativos (que se realizaron en todas las provincias del país y, a lo largo de estos 10 años, ya se han dictado más de 300). Desde ese año también se realizan charlas para todo público y visitas a escuelas primarias o secundarias. Estas actividades han contado con el apoyo del CONICET (programa VocAr), la IUCr, la Fundación Balseiro y de diversas secretarías de ciencia, ministerios de educación y universidades nacionales y fueron posibles gracias a la colaboración de numerosos socios de la AACr.

En esta charla, haremos un recorrido por la historia de la AACr en estos 20 años, compartiendo algunos detalles más sobre el momento de su fundación y sobre las actividades que se desarrollaron posteriormente. Además, aprovecharemos a agradecer y homenajear a muchos colegas que han acompañado el crecimiento de nuestra asociación.



XIX REUNIÓN ANUAL
ASOCIACIÓN ARGENTINA
DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



**SYNERGY BETWEEN CRYSTALLOGRAPHY AND COMPUTATIONAL SIMULATIONS.
THE STRUCTURE-FUNCTION RELATIONSHIP OF A VIRAL CAPSID
AS AN INTERESTING EXAMPLE**

M.D. Costabel*

*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), Instituto de Física del Sur (IFISUR), UNS-CONICET.
Av. L.N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca*

**marcelo.costabel@uns.edu.ar*

Palabras claves: CRYSTALLOGRAPHY; MOLECULAR DYNAMICS; TRIATOMA VIRUS

Nowadays, the synergy of methodologies is, undoubtedly, a fundamental strategy to accelerate and expand knowledge in science.

In this work, we present an amazing example where Crystallography, the most important experimental technique for solving protein structures, and Computational Simulations, which offer the possibility to analyze dynamic aspects of these structures, play together to propose a mechanism for one of the fundamental steps of the viral life cycle.

In several types of viruses, the capsid plays multiple roles. Some of these functions include protecting the genome from chemical stress and enzymatic attack, and sensing appropriate environmental conditions to safely release the RNA.

We use the structure of the Triatoma Virus (TrV, Dicistroviridae: Cripavirus), an insect virus with an icosahedral capsid, as a model, and focus our attention on the 5-fold symmetry axis, where a pore traverses this capsid radially.

With the help of structural data and computational modeling, we suggest a hypothesis for the disassembly of the viral capsid.



REFLECTOMETRÍA DE RAYOS X CON CONTROL AMBIENTAL: UNA TÉCNICA VERSÁTIL PARA ESTUDIAR LA ESTRUCTURA DE PELÍCULAS DELGADAS POROSAS

M.C. Fuertes*

Gerencia Química & INN, Centro Atómico Constituyentes, CNEA, CONICET, San Martín, Buenos Aires
Instituto Sabato, CNEA - UNSAM, San Martín, Buenos Aires
*cecilia.fuertes@conicet.gov.ar

Palabras claves: XRR; SOL-GEL; PELÍCULAS; ÓXIDOS; POROSIDAD

Las películas delgadas desempeñan un papel fundamental en muchos dispositivos utilizados en diversos campos de la ciencia y la tecnología. En particular, las películas de óxidos se destacan por su robustez y estabilidad química y mecánica bajo distintas condiciones de operación, lo que las hace ideales para aplicaciones en óptica, electrónica, sensado y protección de superficies. La síntesis de óxidos porosos utilizando el método sol gel y agentes porógenos permite generar películas con composición muy precisa (incluyendo óxidos puros, mixtos y materiales híbridos), espesor controlado, y porosidad accesible y ordenada en la mesoescala (poros entre 2 y 50 nm de diámetro). La estructura porosa de estas películas les otorga nuevas funcionalidades derivadas de su elevada área superficial específica, y permite la incorporación de una alta densidad de funciones, así como nanopartículas y polímeros dentro del óxido.

La reflectometría de rayos X (XRR) es una técnica comúnmente utilizada para caracterizar la estructura de películas delgadas. Si la película está soportada y tiene baja rugosidad, la técnica XRR permite determinar su espesor y calcular su densidad electrónica. Además, en el caso de películas con poros ordenados en la mesoescala, es posible estimar la distancia interporo a partir de mediciones de la difracción del cristal de poros a ángulos bajos.

En esta presentación se mostrará el desarrollo y la implementación de un sistema de control ambiental acoplado a un difractómetro de rayos X que permite medir las densidades electrónicas de películas con humedad controlada. Este arreglo experimental hace posible calcular la porosidad total y la porosidad accesible de películas de óxidos mesoporosos (Fig. 1) y de películas formadas por partículas. Se comentará el desarrollo realizado en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS, Brasil) y su adaptación a un difractómetro convencional de laboratorio. Finalmente, se presentarán ejemplos de determinaciones de llenado de poros con otras sustancias como polímeros y nanopartículas metálicas.

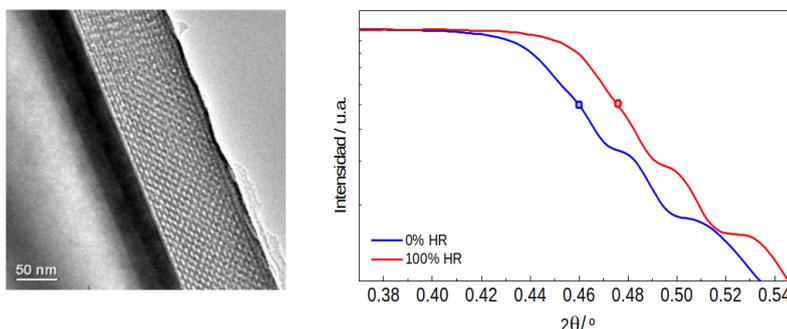


Figura 1. (a) Micrografía de TEM de perfil de una película de sílica mesoporosa. (b) Variación del ángulo crítico de reflexión total al llenar los mesoporos de un film de titanía con agua. HR: humedad relativa.

- [1] J. Morrone, J.I. Ramallo, C. Boissière, P.C. Angelomé, M.C. Fuertes, Chem. Mater. 35 (2023) 8897-8908.
- [2] M. Rafti, A. Brunsen, M.C. Fuertes, O. Azzaroni, G. Soler-Illia, ACS Appl. Mater. Interfaces 5 (2013) 8833-8840.
- [3] I.L. Violi, M.C. Fuertes, P.C. Angelomé, Composite materials based on mesoporous oxides and noble metal nanoparticles in Materials Nanoarchitectonics. From Integrated Molecular Systems to Advanced Devices, Elsevier (2024).



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



CRISTALOGRAFÍA USANDO HACES DE NEUTRONES

G. Aurelio*

Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones, Comisión Nacional de Energía Atómica. Av. Bustillo 9500 (8400) San Carlos de Bariloche, RN

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

**gaurelio@cab.cnea.gov.ar*

Palabras claves: DIFRACCIÓN; NEUTRONES; LAHN

Desde el descubrimiento del neutrón en 1932 por James Chadwick [1], el uso de haces de neutrones intensos como una sonda para el estudio de la materia se ha ido incrementando sin pausa, brindando a la comunidad científica resultados únicos y valiosos en varias áreas del conocimiento. Para la cristalografía, la difracción de neutrones se ha ido convirtiendo en una herramienta fundamental. Se destaca por su precisión en la localización de átomos livianos, como hidrógeno, oxígeno o litio, en presencia de elementos pesados. Su neutralidad facilita la utilización de complejos entornos de muestra, que cada vez son más demandados para llevar adelante estudios *in situ* e *in operando* de materiales y procesos de interés creciente en la actualidad, como aquellos vinculados a energías renovables. Su sensibilidad al magnetismo los vuelve imprescindibles a la hora de estudiar tópicos candentes como la multiferroicidad, la superconductividad, el magnetismo molecular y la espintrónica. De hecho, una rama completa de la cristalografía se dedica al estudio de estructuras magnéticas, y ha realizado enormes progresos en las últimas décadas. Esto es gracias a una combinación interesante de factores, como las mejoras instrumentales en sistemas de detección, transporte y óptica neutrónica en todo el mundo, los avances computacionales que facilitan el manejo e interpretación de los datos, y un marcado desarrollo en las herramientas de análisis de datos y teoría de simetrías magnéticas para poder abordar casos cada vez más complejos que van de la mano con los nuevos fenómenos en estudio en este terreno. El análisis de simetrías magnéticas ha permitido revelar y comprender aspectos subyacentes a las propiedades físicas en cristales con comportamientos magnéticos no-convencionales y esto marca el camino hacia una electrónica más sustentable y eficaz en un mundo que no para de demandar soluciones energéticas.

A pesar de sus muchas ventajas, hay que reconocer que para usar estas técnicas las personas deben desplazarse hacia laboratorios de gran escala, con haces de neutrones intensos, donde llevar adelante los experimentos. El desafío es aún mayor para la ciencia latinoamericana, siendo que la mayoría de estos laboratorios están a enormes distancias. Sin embargo, esta situación está muy próxima a revertirse, ya que tendremos en Argentina la posibilidad de realizar experimentos de primer nivel empleando haces de neutrones. Con la puesta en marcha del Reactor Argentino Multipropósito RA-10, cuya obra civil ya está finalizada, abrirá sus puertas el Laboratorio de Haces del LAHN con una suite inicial de 5 instrumentos a partir de 2026 [2]. En esta charla presentaré las principales contribuciones de la difracción de neutrones, con especial énfasis en la difracción magnética, a problemas de actualidad e intentaré entusiasmar a la audiencia de la AACr para incorporar las técnicas neutrónicas a su caja de herramientas!

[1] J. Chadwick, *Nature* 129 (1932) 312.

[2] G. Aurelio, A. Bengtsson, K. Pierpauli, *Revista Ciencia Hoy* 31 (2022) 37.



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



EL LABORATORIO ARGENTINO DE HACES DE NEUTRONES: TÉCNICAS NEUTRÓNICAS PARA ARGENTINA Y LATINOAMÉRICA

J.R. Santisteban*

Comisión Nacional de Energía Atómica - Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones

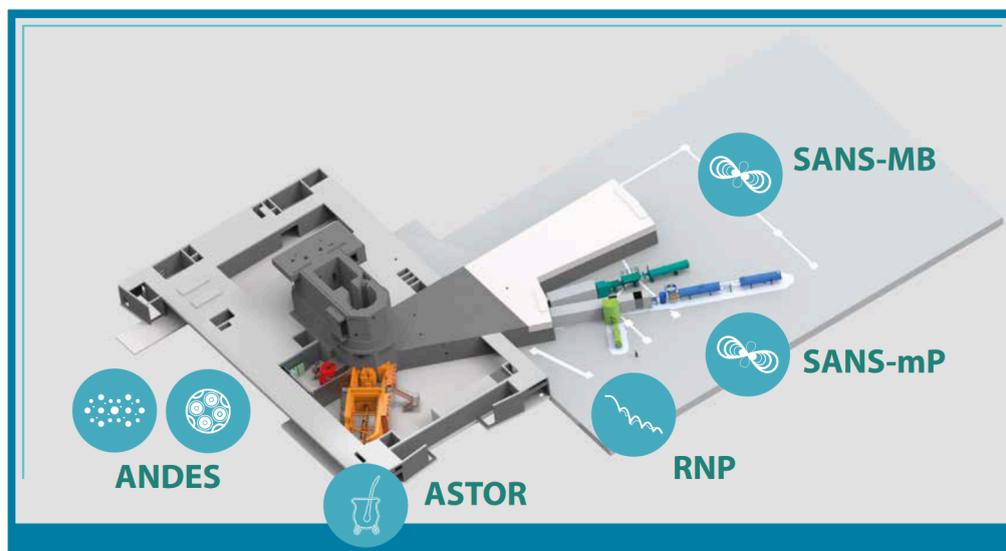
*J.R.Santisteban@cab.cnea.gov.ar

Palabras claves: TÉCNICAS NEUTRÓNICAS; GRANDES INSTALACIONES; REACTOR RA-10

El Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones (LAHN) [1] es un centro de investigación en la Comisión Nacional de Energía Atómica dedicado al estudio y caracterización de la materia por medio de técnicas neutrónicas. La difracción, reflexión y dispersión de neutrones son técnicas complementarias a sus equivalentes con rayos X, y permiten estudiar sistemas que resultan muy difíciles o imposibles de caracterizar por estos últimos. Por las características de su interacción con la materia, los neutrones resultan ideales para el estudio de sistemas compuestos por átomos livianos, y/o aquellos que presentan estructuras magnéticas. Debido a su alta penetración, los haces de neutrones permiten realizar estudios *in situ* mediante el uso de dispositivos que modifican las condiciones físicas o químicas del ambiente en el que se encuentra el sistema de interés durante los experimentos.

El LAHN funcionará como un laboratorio internacional, de acceso abierto y orientado a usuarios y usuarias, que proveerá herramientas experimentales de clase mundial para la investigación en un amplio espectro de áreas científicas, desde la química, física y biología, hasta la nanotecnología y el patrimonio natural y cultural, entre muchas otras. El LAHN utilizará los haces de neutrones fríos y térmicos de alto flujo generados por el reactor argentino RA-10 en el Centro Atómico Ezeiza, cuya puesta en marcha está planificada para el año 2025, para ofrecer a la comunidad las técnicas de difracción, dispersión a bajo ángulo, reflectometría, espectrometría, tomografía e imágenes con neutrones. Al iniciar sus operaciones, el LAHN dispondrá de cinco instrumentos, operados por científicos especializados en los distintos campos de aplicación, junto a diversos dispositivos de entornos de muestra, complementados por laboratorios de rayos X.

En esta charla se presentará el estado de avance del LAHN, haciendo énfasis en los desafíos encontrados, y las estrategias adoptadas para llevar adelante una instalación de esta envergadura en nuestro país, que posee la capacidad de lograr un alto impacto sobre las líneas de investigación y desarrollo nacionales y regionales.



[1] G. Aurelio et al., Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones: “Técnicas neutrónicas para la ciencia argentina y latinoamericana”, Comisión Nacional de Energía Atómica (2023). ISBN 978-987-1323-87-6.



GANADOR PREMIO G. PUNTE

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES OXÍDICOS: PEROVSKITAS DISEÑADAS COMO CONDUCTORES IONICOS ELECTRÓNICOS

C. Miranda^{1*}, J.C. Pedregosa^{2,3}, C.A. López^{2,3}

¹Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (UE-CONICET Nodo Bariloche) - División de Resonancias Magnéticas, Gerencia Física, Gerencia de Área Investigación, Desarrollo e Innovación, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. Exequiel Bustillo Km 9.500 - S. C. Bariloche (RN)

²Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (UNSL-CONICET), Alte Brown 1455, San Luis, San Luis.

³Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Av. Ej de Los Andes 750, San Luis, San Luis

*carlosmiranda@cnea.gob.ar

Palabras claves: ENERGÍA; FISICOQUÍMICA INORGÁNICA

La tesis versa sobre la exploración experimental de una familia de compuestos conocidos como elpasolitas, investigando su potencial aplicación en celdas de combustible tipo SOFC. Estos compuestos presentan una estructura derivada de las criolitas, con octaedros metal-oxígeno desconectados, guardando una similitud con las perovskitas. La tesis se enfoca en el estudio de la fase $\text{Sr}_{11}\text{Mo}_4\text{O}_{23}$, investigando el dopaje con metales para mejorar la conductividad iónica.

Entre los principales hallazgos se encuentra:

- Síntesis de fases cúbicas mediante dopaje con metales aliovalentes, lo que mejora la conductividad y reduce la temperatura de síntesis. El dopaje con Nb, en particular, resultó ser el más eficaz, alcanzando niveles de conductividad comparables a materiales estándar como YSZ.

- Comparación de métodos de síntesis: el método de citrato mostró una mayor homogeneidad y calidad en las muestras frente al método de estado sólido.

- Impacto de los dopantes: los metales de transición como Nb y Ta mostraron mejoras en las propiedades de transporte, mientras que otros como el aluminio presentaron efectos negativos inesperados.

- Análisis estructural mediante cristalografía y técnicas avanzadas (sincrotrón y neutrones) permitió comprender cómo los dopantes afectan la estructura, particularmente la posición de los átomos de oxígeno, clave para la conducción de iones.

- Medidas de transporte, usando espectroscopia de impedancia, revelaron una buena conductividad a altas temperaturas (650-700 °C), con un mecanismo de conducción entre granos.

Finalmente, se destaca la importancia de una estructura cúbica estable para las propiedades de conducción de los materiales, y la necesidad de lograr una morfología adecuada para soportar las condiciones exigentes de las celdas de combustible.

CONTRIBUCIONES ORALES



NUEVOS CODOPANTES PARA LA ESTABILIZACIÓN DEL POLIMORFO CÚBICO EN CERÁMICOS DE CIRCONIA ESTABILIZADA CON ESCANDIA (ScSZ)

V. Contini^{1*}, G. Suárez², A.L. Larralde³, C.A. López⁴ y D.G. Lamas⁵

¹Universidad Nacional de La Rioja (UNLaR), Luis de la Fuente s/n, La Rioja

²CETMIC, CIC-CONICET, Camino Centenario y 506, M.B. Gonnet, Buenos Aires

³CONICET-INTI, Av. Gral. Paz 5445, San Martín, Buenos Aires

⁴INTEQUI, UNSL-CONICET, Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Ejército de los Andes 950, San Luis

⁵Laboratorio de Cristalografía Aplicada, ITECA, UNSAM-CONICET. Av. 25 de mayo 1169, San Martín, Buenos Aires

*vcontini@unlar.edu.ar

Palabras claves: CIRCONIA; ELECTROLITO CERÁMICO; CONDUCTORES IÓNICOS; MECANOSÍNTESIS

Los materiales cerámicos basados en “circonia” (usando la jerga de los ceramistas para llamar a un óxido, en este caso al dióxido de circonio, ZrO_2) son muy conocidos y estudiados por sus excelentes propiedades mecánicas y eléctricas, siendo conductores iónicos a alta temperatura cuando se los dopa con óxidos de cationes divalentes o trivalentes, como CaO , Y_2O_3 , Sc_2O_3 , etc., ya que esto genera vacancias de oxígeno, lo que permite el transporte de aniones O^{2-} a través de ellas. Desde un punto de vista cristalográfico, es un caso interesante de polimorfismo, ya que el polimorfo estable a temperatura ambiente, correspondiente al sistema cristalino monoclinico, tiene muy pobres propiedades y para lograr materiales de alta performance es necesario retener los polimorfos de alta temperatura, tetragonal o cúbico. Este último se destaca por excelente conductividad iónica por O^{2-} y es el más importante para aplicaciones electroquímicas. Cuando se utiliza escandia (Sc_2O_3) como dopante, materiales conocidos como “circonia estabilizada con escandia” (ScSZ), el problema de polimorfismo es aún más complejo, porque aparecen tres nuevos polimorfos conocidos como β , γ y δ , todos ellos correspondientes al sistema cristalino romboédrico y de muy pobres propiedades eléctricas, que curiosamente no se encontraron con ningún otro dopante. En el rango de composiciones de mejores propiedades eléctricas, que corresponde a ZrO_2 dopada con 8 a 10 %molar de Sc_2O_3 , el polimorfo estable a temperatura ambiente es el β y este transforma al polimorfo cúbico a temperaturas mayores a 550 °C. La conductividad iónica por ión O^{2-} que presenta el polimorfo cúbico en los materiales de ScSZ es la más alta de todos los cerámicos basados en ZrO_2 conocidos hasta hoy, pero la degradación que pueden sufrir por el cambio de volumen que se produce en la transformación $\beta \leftrightarrow$ cúbico es un serio problema tecnológico. Para evitarlo, una estrategia es introducir una pequeña proporción de otro óxido, un codopante, que estabilice el polimorfo cúbico a temperatura ambiente, evitando así la transformación de fases mencionada. Los óxidos codopantes más estudiados son Y_2O_3 y CeO_2 y se suelen agregar en una proporción de un 1 %molar.

El objetivo de este trabajo es evaluar la performance de gadolinia (Gd_2O_3) y samaria (Sm_2O_3) como estabilizadores del polimorfo cúbico en cerámicos de ScSZ y comparar sus propiedades con un grupo de control sin codopantes y otro de ScSZ codopado con itria (Y_2O_3). Se prepararon muestras de ZrO_2 -10 %molar Sc_2O_3 , tanto sin codopante como con 1 %molar de Y_2O_3 , Sm_2O_3 o Gd_2O_3 por reacción de estado sólido activada por molienda de alta energía. Se exploraron diferentes tiempos de molienda (de 0 a 60 minutos) y temperaturas de sinterizado (entre 1100 °C y 1500 °C). La caracterización se realizó por difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM), análisis de densidad, dureza Vickers y espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

El análisis por XRD evidencia que los codopantes seleccionados logran estabilizar completamente el polimorfo cúbico a temperatura ambiente, si se preparan con un tiempo de molienda de 30 minutos y temperaturas de sinterizado de 1300 °C o superior. Las muestras preparadas en estas condiciones alcanzaron densidades superiores al 96 % de la densidad teórica del material. La conductividad iónica determinada por EIS no mostró caídas bruscas en función de la temperatura, confirmando la retención del polimorfo cúbico en todo el rango estudiado (entre 200 y 800 °C). Esto demuestra que la samaria y la gadolinia son alternativas competitivas para su aplicación en dispositivos electroquímicos basados en electrolitos cerámicos de circonia, como las celdas de combustible de óxido sólido o los electrolizadores de óxido sólido.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN EMPLEANDO LA PLATAFORMA $[\text{Ir}(\text{ppy})_2]^+$ Y LIGANDOS PSEUDOHALÓGENO

I.N. Arceo^{1,2*}, J. Alday^{1,2}, A. Rivas Marquina^{1,2}, A. Cadranel^{1,2,3}, S.A. Suárez^{1,2}, F. Di Salvo^{1,2}

¹UBA, FCEN, DQIAQF, Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EG CABA

²INQUIMAE (UBA-CONICET) CABA

³Department of Chemistry and Pharmacy & ICMM, Physical Chemistry I, FAU Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany

*arceo@qi.fcen.uba.ar

Palabras claves: IRIDIO FENILPIRIDINAS; PSEUDOHALÓGENO; ESTRUCTURA CRISTALINA

Los compuestos de coordinación con centros metálicos de configuración d^6 de bajo spin han despertado gran interés debido a que pueden presentar propiedades fotoluminiscentes muy destacadas, con rendimientos cuánticos (Φ) cercanos a la unidad [1]. En particular, las especies de Ir^{3+} se comportan como luminóforos alternativos a los compuestos de Ru^{2+} convencionales, dado que presentan algunas características ventajosas, como la foto y termo-estabilidad, altos Φ , tiempos de vida de fotoluminiscencia (τ) relativamente cortos y espectros de absorción/emisión sintonizables a partir del control de la identidad de los ligandos [2,3].

Motivados por lo anterior, uno de los proyectos que estamos desarrollando en nuestro laboratorio tiene como objetivo la síntesis y estudio de propiedades de nuevos compuestos de coordinación basados en fenilpiridinas (ppy) de Ir^{3+} . En este trabajo se presenta la síntesis y el estudio estructural detallado de tres compuestos de coordinación de esta familia, dos de la forma $\text{TBA}[\text{Ir}(\text{ppy})_2\text{Y}_2]$ ($\text{Y} = \text{CN}^-$ (**1**), NCO^- (**2**); TBA = tetrabutilamonio), y el restante de la estructura $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{N}_3)(\text{DMSO})]$ (**3**). Para los tres la estructura fue determinada mediante difracción de rayos-X de monocristal (SCDRX), y además, se completó su caracterización y el estudio de algunas de sus propiedades empleando técnicas espectroscópicas, incluyendo UV-Vis, IR, RMN y emisión, espectrometría de masas y espectroscopía ultrarrápida de absorción de transiente. Todos estos análisis fueron luego contrastados con cálculos de estructura electrónica mediante DFT.

En los tres casos, el metal presenta una estructura octaédrica levemente distorsionada debido a la rigidez de los ligandos ppy, y los ángulos y distancias de enlace resultaron congruentes con compuestos similares reportados previamente, y los cálculos de DFT. Por otro lado, fue posible relacionar las distancias de enlace entre el metal y los ligandos pseudohalógenos según su naturaleza σ donante, π aceptor, o π donante. En cuanto a las estructuras supramoleculares, **1** y **2** dan lugar a estructuras de “canales”, dirigidas principalmente por la interacción directa del ligando con TBA^+ en el caso de **1**, o mediada por una molécula de agua en el caso de **2**. Para el compuesto **3**, debido a la ausencia del contraión, el empaquetamiento cambia radicalmente para optimizar distintos tipos de interacciones entre ligandos de complejos adyacentes, que, si bien están presentes en las estructuras anteriores, no prevalecen frente a las interacciones con el contraión.

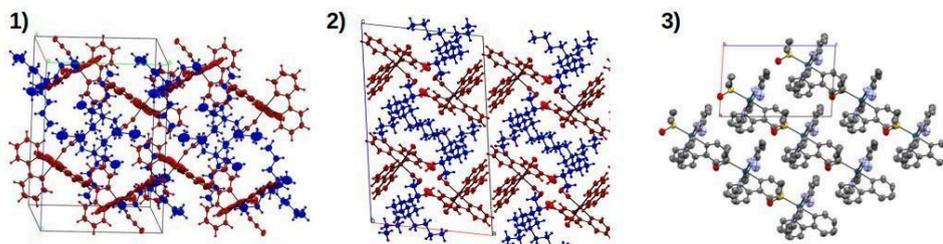


Figura 1. Empaquetamiento cristalino desarrollado para los compuestos **1-3**

[1] C. Ulbricht, B. Beyer, A. Winter & U. S. Schubert, Adv. Mater, 21 (2009), 4418-4441.

[2] A. B. Kajjam and S. Vaidyanathan, Chem. Rec. 18 (2018), 293-349.

[3] Y. You & S. Y. Park, Chem. Sic. Dalt. Trans. (2009) 1267-1282.



SISTEMA KBr-KCl: UN EJEMPLO PEDAGÓGICO PARA LA ENSEÑANZA EXPERIMENTAL DE LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X

M.E. Saleta^{1*}, M. Melone¹, L.V. Moggi¹, A. Butera¹

¹Instituto Balseiro, U.N. Cuyo - CNEA, e Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA-CONICET, S.C. de Bariloche

*martin.saleta@ib.edu.ar

Palabras claves: ENSEÑANZA DE LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X; FACTOR DE ESTRUCTURA; LEY DE VEGARD

En este trabajo presentamos un sencillo experimento que permite ilustrar diferentes tópicos de la difracción de rayos X mediante el estudio de una solución sólida de $\text{KBr}_{1-x}\text{Cl}_x$ (G.E. Fm-3m, n° 225). Los cristales se obtienen disolviendo cantidades estequiométricas de KBr y KCl en agua desionizada. La solución es evaporada sobre una placa calentadora de forma tal de obtener un polvo fino del compuesto. Si se desean obtener cristales de mayor tamaño se deja evaporar la solución concentrada por un tiempo prolongado (evaporación lenta). Una vez obtenidos los polvos se realizan los difractogramas. Los mismos se analizan para obtener los parámetros de celda y la intensidad de los picos. En particular la comparación de la intensidad de los picos es un buen ejemplo para discutir el factor de estructura, observándose cómo la intensidad de los picos con (hkl) impares decrece a medida que se incorporan átomos de Cl (Fig. 1a). Este experimento permite analizar la diferencia entre una solución sólida y mezclas o *composites* (Fig. 1b). Por último, podemos verificar el cumplimiento de la ley de Vegard, obteniéndose la relación lineal entre el parámetro de celda y el contenido de Br/Cl (Fig. 1c).

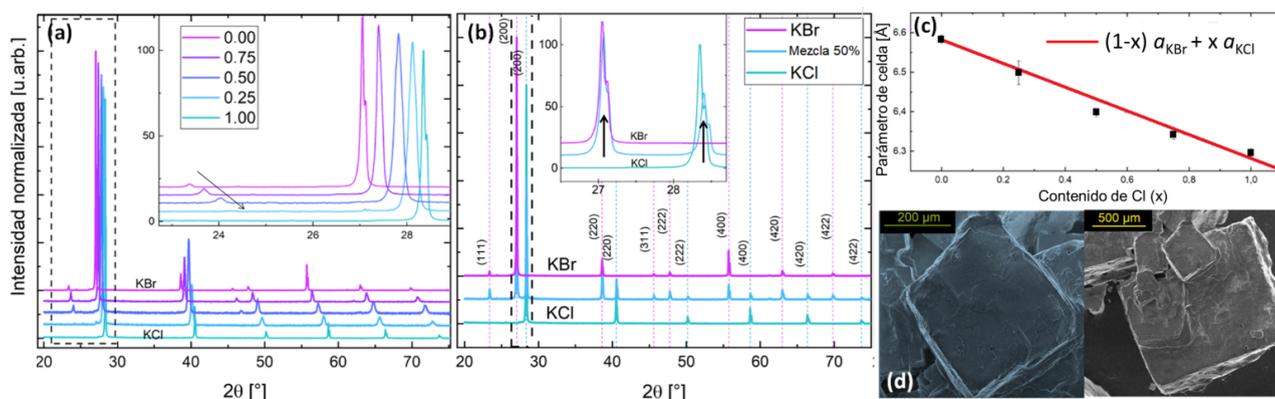


Figura 1: (a) Difractogramas de la solución sólida $\text{KBr}_{1-x}\text{Cl}_x$. Recuadro: disminución de la intensidad del pico (111) al incorporar Cl. (b) Patrones de difracción de KBr, KCl y compuesto 0.5KBr•0.5KCl. Se indican los valores (hkl). Las curvas fueron desplazadas verticalmente para una mejor visualización. (c) parámetro de celda en función del contenido de Cl. (d) Imágenes SEM de los cristales.

Un punto extra que se puede agregar a la experiencia es visualizar los cristales utilizando microscopía óptica para los cristales macroscópicos o electrónica de barrido para los microcristales y analizar las caras y morfología de los mismos (Fig. 1d).

Agradecemos a nuestros colegas de la Cátedra de Experimental II del Instituto Balseiro y a todos los alumnos que han realizado esta práctica. Sus discusiones, consejos y trabajo han colaborado para la realización de este trabajo. Un agradecimiento especial a los encargados del pañol, Germán Zoja, Tamara Guerrero y Daniel Chueca por su invaluable colaboración.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LAS PEROVSKITAS $TmCr_xCo_{1-x}O_3$ ($0 < x < 1$)

M. Vivas Arellano^{1*}, J.M. De Paoli¹, A. Maignan², C. Martin², R.E. Carbonio¹

¹Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC), CONICET-UNC. Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. X5000HUA Córdoba

²Laboratoire CRISMAT, Normandie Université, ENSICAEN, UNICAEN, CNRS. 14050 Caen, France

*manuel.arellano@unc.edu.ar

Palabras claves: PEROVSKITA; DRXP-SINCROTRÓN; MAGNETISMO

Desde hace ya más de 20 años, los óxidos mixtos con estructura cristalina tipo Perovskita ABO_3 han sido ampliamente estudiados debido a que poseen propiedades magnéticas y eléctricas de interés para aplicaciones tecnológicas. Dentro de este grupo, las ortocromitas ($LnCrO_3$) y las ortocobaltitas ($LnCoO_3$) han sido investigadas, ya que exhiben magnetización reversa y/o reorientación de espín [1]. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización, tanto estructural como magnética, de la serie de Perovskitas $TmCr_xCo_{1-x}O_3$ ($0 < x < 1$).

Las muestras policristalinas de esta serie de óxidos mixtos se sintetizaron a través del método sol-gel [1]. El precursor resultante en cada caso se trató posteriormente a 600 °C en aire durante 12 h. Las muestras con alto contenido de Co ($x > 0$) se obtuvieron a 1000 °C utilizando una presión de oxígeno de alta pureza de 100 bar durante 12 h, mientras que las ricas en Cr ($x < 1$) se lograron a 1200 °C en aire por 12 h. Mediante difracción de rayos X de polvo de laboratorio, todas estas muestras sintetizadas se identificaron como Perovskitas simples ortorrómbicas con un alto grado de pureza ($> 96\%$).

Para las composiciones $x = 0,2; 0,4; 0,6$ y $0,8$, se realizaron mediciones de difracción de rayos X de polvo de radiación sincrotrón (SXRPD) en el ESRF (línea ID31, $\lambda = 0.165312$ Å), Grenoble, Francia. El refinamiento de las estructuras cristalinas se llevó a cabo mediante el método de Rietveld, utilizando el programa FULLPROF (Fig. 1). Como resultado principal se obtuvo que todas las muestras pertenecen al grupo espacial $Pbnm$ (#62) y son isoestructurales con la Perovskita $TmCoO_3$ [2]. El volumen de la celda unidad y las distancias medias de enlace $\langle Tm-O \rangle$ y $\langle M-O \rangle$ disminuyen conforme aumenta el contenido de Co^{3+} , como se esperaba debido a los radios iónicos de los cationes del sitio B (Cr^{3+} :

$0,755$ Å y Co^{3+} (LS): $0,685$ Å). Los ángulos de inclinación δ_1 y δ_2 también disminuyen ligeramente con el incremento de Co^{3+} .

Se obtuvieron curvas M vs T , ZFC-FC, de 5 a 300 K a 100 G de campo aplicado y se realizaron ciclos de magnetización isotérmica de -5 a $+5$ T a 5 K para todas las muestras. Las muestras con alto contenido de Cr presentan un comportamiento antiferromagnético (T_N entre 80 y 115 K) y magnetización reversa por debajo de 30 K, mientras que las ricas en Co son paramagnetos.

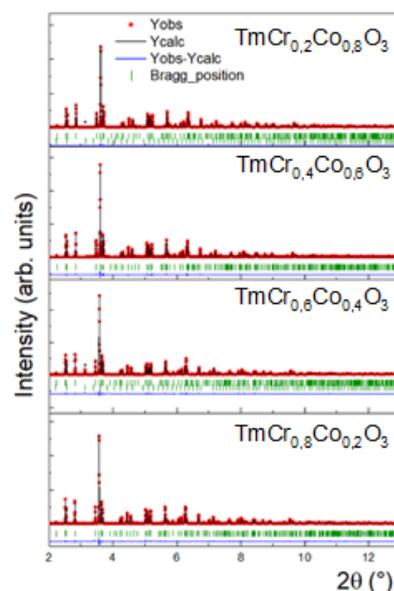


Figura 1. Refinamientos de Rietveld de los patrones de SXRPD para $TmCr_xCo_{1-x}O_3$. *Índice de reflexión principal para Tm_2O_3 .

[1] F. Pomiro, R.D. Sánchez, G. Cuello, A. Maignan, C. Martin, R.E. Carbonio, Phys. Rev. B 94 (2016) 134402.

[2] J.A. Alonso, M.J. Martínez-Lope, C. de la Calle, V. Pomjakushin, J. Mater. Chem. 16 (2006) 1555.



EVALUACIÓN DEL EFECTO DEL B₂O₃ SOBRE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELÉCTRICAS DEL NaZr₂(PO₄)₃

S. TERNY^{1*}, R. SALGADO¹, M.A. FRECHERO¹

¹Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur (UNS), INQUISUR- CONICET, Av. Alem 1253, Bahía Blanca, C.P. 8000

*soledad.terny@uns.edu.ar

Palabras claves: NASICON; CIRCONIA; ELECTROLITO SÓLIDO

Un gran número de materiales han sido sugeridos como candidatos para ser utilizados en baterías de ion sodio. Dada la alta movilidad de iones Na⁺ dentro de la red tridimensional romboédrica con estructura R3c, el material tipo NASICON, el NaZr₂(PO₄)₃ se destaca dentro de este grupo de materiales. Debido a su estructura cristalina única y a la posibilidad que presenta de generar diferentes sustituciones iónicas, la familia de compuestos NZP es elegida dado que presenta baja expansión térmica, alta conductividad iónica, alta estabilidad química y alta resistencia a las radiaciones.

En el presente trabajo, se propuso la posible sustitución aniónica del ion fosfato por el ion borato a través del uso de óxido de boro como reactivo de partida en materiales conductores iónicos de fórmula NaZr₂(PO₄)₃. Los nuevos materiales fueron sintetizados mediante el método de estado sólido. Principalmente, se buscó comprender el rol del boro en la estructura, y como se ven afectadas principalmente las propiedades eléctricas de los materiales. Se pudo observar que a medida que aumenta la cantidad de ion borato y disminuye el contenido de ion fosfato, una segunda fase se desprende (ZrO₂) y se vuelve mayoritaria cuando la sustitución total se completa. Los valores de conductividad aumentan con respecto al NZP puro, y los parámetros de red muestran una pequeña variación probablemente debido a la incorporación de una pequeña proporción de B a la estructura. Finalmente, se presume que la sustitución aniónica no prospera, pero se obtuvieron indicios de que el ion B³⁺ probablemente ocupe el lugar de ion Zr⁴⁺ en la estructura.

Los materiales fueron caracterizados estructural y eléctricamente mediante diversas técnicas como DRX, FTIR, RAMAN CONFOCAL, SEM-EDX y EIS.

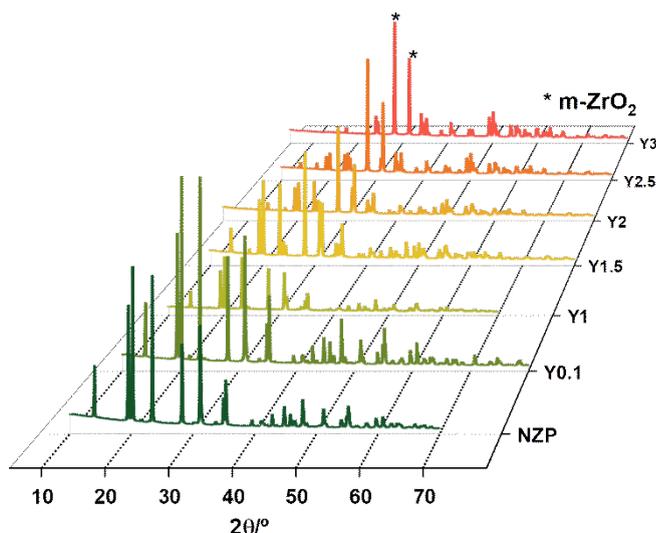


Figura 1. Difractogramas de las muestras sintetizadas por el método de reacción de estado sólido.



**SÍNTESIS HIDROTERMAL VS MOLIENDA ASISTIDA:
ESTRUCTURAS BASADAS EN CdWO₄ DOPADAS CON Na⁺ y Eu³⁺,
ANÁLISIS ESTRUCTURAL, LUMINISCENCIA Y SENSADO QUÍMICO**

V.D. Ponce^{1*}, G.E. Gómez¹, C.A. López¹, G.E. Narda¹, R. Van Deun²

¹INTEQUI (UNSL-CONICET). FQByF (UNSL), Almirante Brown 1455, 5700, San Luis

²L³ - Luminescent Lanthanide Lab, f-element coordination chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281, Building S3, 9000

*vanesap70@gmail.com

Palabras claves: LANTÁNIDOS; ÓPTICA; SENSADO; DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Los materiales ópticos tradicionales, tales como los colorantes y los *quantum dots*, tienen la capacidad de emitir a diferentes longitudes de onda en rangos que van desde el UV al visible e infrarrojo. Sin embargo, presentan desventajas como el foto-blanqueo, la contaminación ambiental y el uso de complejos procesos de purificación. Por eso, los materiales dopados con lantánidos resultan ser una alternativa prometedora para mitigar estas problemáticas [1]. Los lantánidos juegan un rol significativo en diversos campos, debido a sus aplicaciones en áreas como la iluminación, incluyendo láseres y fósforos; dispositivos como sensores y centelleadores; en medicina, a través de bio-imágenes; y en seguridad, como etiquetas antifalsificación. Estos iones ofrecen propiedades ópticas únicas debido a la capacidad de modular el color de emisión, y de poseer bandas de emisión estrechas acompañadas de tiempos de vida y rendimientos cuánticos grandes [2-4]. Un aspecto fundamental en las propiedades ópticas de los lantánidos es la matriz y sus características estructurales. Por esta razón se hace esencial la determinación del sitio ocupado por los activadores para comprender la relación entre las propiedades luminiscentes y su estructura, y así poder adaptar sus propiedades a partir de la modificación de la composición del huésped [5, 6].

Este trabajo está centrado en la síntesis y caracterización de una familia de compuestos con fórmula general Cd_{1-2x}Eu_xNa_xWO₄ donde x = 0, 0.01, 0.05, 0.1 y 0.2. Las síntesis fueron llevadas a cabo mediante molienda de alta energía, mientras que la fase con estequiometría Cd_{0.8}Eu_{0.1}Na_{0.1}WO₄, fue obtenida también por síntesis hidrotermal. Todas las muestras fueron caracterizadas mediante difracción de rayos X de polvos acompañados de refinamientos Rietveld. Todas las fases dopadas modeladas en el sistema monoclinico grupo espacial P2/c (#13) donde los Cd y W se encuentran en sitios octaédricos.

Las propiedades ópticas de estos materiales se estudiaron a través de los respectivos espectros de excitación y emisión, así como las medidas de los perfiles de decaimiento, lo que permitió determinar los tiempos de vida. En los espectros se observaron las transiciones 4f-4f ⁵D₀ → ⁷F_J (J = 0 - 4) con máximos a 611 nm, características del ion lantánido Eu³⁺. Además, se demostró una correlación entre el tipo de ion huésped y el color de emisión de los materiales obtenidos.

La muestra conteniendo un 5% de Eu, fue seleccionada para el sensado químico en presencia de diferentes solventes como acetona, DMF, benceno, entre otros; así como también a soluciones de diferentes cationes (Zn²⁺, Cd²⁺, etc.) donde se observó y analizó el fenómeno de *quenching* del material activo. Los resultados obtenidos resultaron ser prometedores para la elaboración de dispositivos sensores basados en películas delgadas.

[1] H. Xu, Y. Wei, R. Wang, G. Liang, T. Sheng, Z. Fu, Mater. Chem. 36 (2024) 101968.

[2] N. Jaroch; J. Czajka; A. Szczeszak, Sci. Rep. 13 (2023) 10773.

[3] X. Liu; C. Sun; C. Xu; Q. Wang; K. Wang; D. Zhang Ceram. Int. (2024).

[4] K. Manjunatha; M. Ho; T. Hsu; H. Chiu; T. Li; B. Kumar; P. Reddy; T. Chan, Y. Wu; B. Lin; A. Karmenyan; C. Cheng; A. Gandhi; S. Wu, Int. J. Mol. Sci. 23 (2022) 15123.

[5] B. Xiao; M. Schmidt, Inorg. Chem. 56 (2017) 14948-14959.

[6] C. Xia; Y. Chen; X. He; B. Zeng; J. Yang; C. Cui; S. Xie; Y. Guo; X. Liu; L. Li, Inorg. Chem. 63 (2024) 8863-8878.



CRYSTAL ENGINEERING IN THE RATIONAL DESIGN OF PHARMACEUTICAL MATERIALS: REPORT OF A NEW MEBENDAZOLIUM TOSYLATE SALT

E. Gutiérrez^{1*}, M. Russo², E. Brusau², F. Di Salvo³

¹INQUISAL–CONICET, UNSL, San Luis

²Área de Química General e Inorgánica, UNSL, San Luis

³INQUIMAE–CONICET, Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires

*egutierrez@unsl.edu.ar

Palabras claves: RATIONAL DESIGN; CRYSTAL ENGINEERING; SUPRAMOLECULAR SYNTHON; MEBENDAZOLE; *p*-TOLUENESULFONIC ACID

Mebendazole (MBZ) is a synthetic broad-spectrum benzimidazole-derivative anthelmintic drug included in the WHO Model List of Essential Drugs [1] and classified as a class II drug of the Biopharmaceutics Classification System, due to its poor solubility in water but high permeability [2]. Here, we aim to obtain a new solid material that prevents the tautomeric interconversion between the pharmaceutical preferred form C of the drug and its inactive form A [3], and exhibiting solubility and dissolution profiles similar to that of MBZ C.

We rational designed a new material on the basis of the high statistical probability of formation of a $R_2^2(8)$ -type supramolecular synthon between MBZ and sulfonates. This motif was found in all reported structures of multicomponent systems of MBZ with oxoanionic cofomers [4]. The synthesis was performed by slow solvent evaporation from an equimolar solution of MBZ and *p*-toluenesulfonic acid (TsOH, an FDA accepted cofomer) monohydrate in methanol. SC-synchrotron XRD experiment for the structure resolution of the new solid, named MBZH·TsO·H₂O, was performed on the MANACA beamline at Sirius (Brazil). As expected, proton transfer and the formation of a $R_2^2(8)$ motif, driven by hydrogen bonds as the main intermolecular interactions, were confirmed (Figure 1). A water molecule is also found in the crystal structure. This salt is stable up to 104 °C when the endothermic dehydration of the material takes place (Figure 2), yielding a new crystalline phase that was identified as the anhydride MBZH·TsO salt. Second event starts at 172 °C and is associated with the endothermic loss of the ester moiety of the drug. Further experiments are being conducted to fully characterized both new materials.

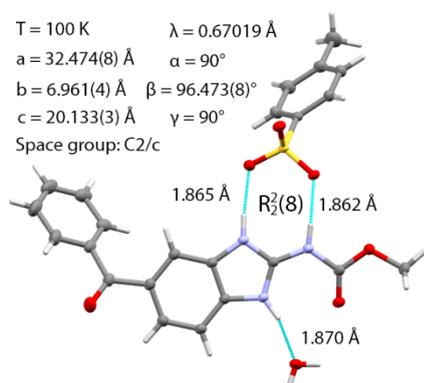


Figure 1. Asymmetric unit of the MBZH·TsO·H₂O salt. Colour code: C, N, O, S. H are represented as sticks of arbitrary radii.

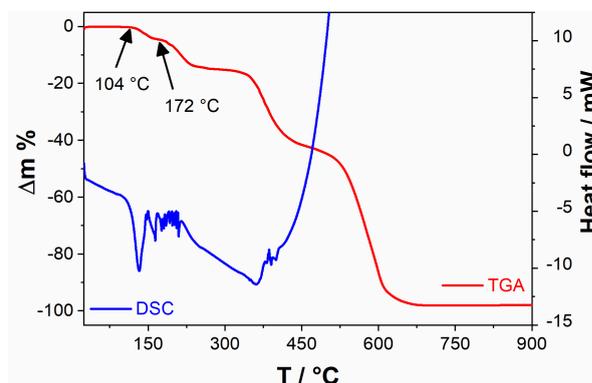


Figure 2. Thermogravimetric analysis (TGA, red) and differential scanning calorimetry (DSC, blue) curves for MBZH·TsO·H₂O.

[1] A. Ayala, H. Siesler, S. Cuffini, J. Raman Spectrosc. 57 (2008) 1150-1157.

[2] E. Swanepoel, M. Liebenberg, M. de Villiers, M. Eur. J. Pharm. Biopharm. 55 (2003) 345-349.

[3] F. Bravetti *et al.*, Chem. A Eur. J. (2022) e202103589.

[4] E. Gutiérrez, A. Godoy, E. Brusau, D. Vega, G. Narda, S. Suárez, F. Di Salvo, RSC Adv. 14 (2024) 181-192.



EVOLUCIÓN DEL CRECIMIENTO DE ÓXIDOS POR OXIDACIÓN CONTROLADA A TEMPERATURA AMBIENTE SOBRE SUSTRATOS DE ALPACA

M.A. Franco^{1*}, M.A. Ulla¹, J.M. Zamaro¹

¹Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), UNL, FIQ, Santiago del Estero 2829, 3000, Santa Fe

*mafrancomurcia@fiq.unl.edu.ar

Palabras claves: PELÍCULA CATALÍTICA; CRECIMIENTO, SÍNTESIS; NANO-ÓXIDOS; COBRE; ZINC, NÍQUEL

Las películas de óxidos de dimensiones nanométricas han demostrado un buen desempeño catalítico en micro-reactores para la reacción de oxidación de CO [1-2]. Recientemente, en el grupo, se obtuvieron películas nanoestructuradas de óxidos de cobre, zinc y níquel mediante oxidación controlada sustratos de alpaca (Cu-Zn-Ni) con vapores oxidantes. Estas películas se componen de nano-óxidos/hidróxidos de cobre altamente dispersos sobre una base de óxidos de zinc y níquel, siendo muy activos y estables en la oxidación de CO [3]. El objetivo del presente trabajo es analizar la evolución del proceso de crecimiento de los óxidos

en las primeras etapas de su formación (1-60 min), mediante tratamientos llevados a cabo a temperatura ambiente.

La muestra tratada por 1h desarrolló una mezcla de fases de Cu(OH)₂ y ZnO (Fig. 1a). Luego de un tratamiento en He (225 °C) las especies Cu(OH)₂ se transforman en CuO con un pequeño tamaño de cristalita. Esto, se corroboró con espectros T-DRIFT, que mostraron tal evolución a temperaturas mayores a 200 °C. Dicha película, exhibió alta actividad catalítica (T⁵⁰ 138°C) y tras la evaluación no mostró cambios significativos en su cristalinidad (Fig. 1a). Las imágenes SEM y análisis EDS de la muestra fresca, mostraron una superficie heterogénea, con regiones ricas en zinc y otras ricas en cobre. En la primera, se desarrollaron cristales de ZnO con morfología de nanohojuelas. En la segunda, se generaron cristales cúbicos de Cu(OH)₂ de ~ 1 μm. Luego de la transformación a CuO en He, éstos conservaron su morfología, pero la misma se perdió parcialmente tras el ensayo catalítico. Los resultados observados permiten analizar el proceso inicial de desarrollo de la capa de la película, lo cual es fundamental para comprender la relación sinérgica entre los óxidos y su desempeño catalítico.

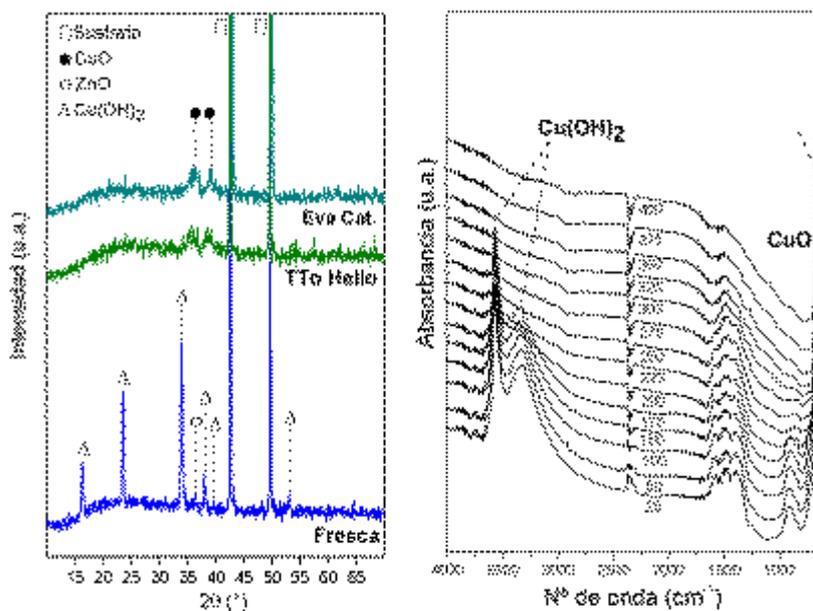


Figura 1. Película obtenida a 25 °C en 60 min: a) Patrones XRD tras la síntesis, tratamiento en He y ensayo catalítico; b) Espectros T-DRIFT in situ en atmósfera inerte.

regiones ricas en zinc y otras ricas en cobre. En la primera, se desarrollaron cristales de ZnO con morfología de nanohojuelas. En la segunda, se generaron cristales cúbicos de Cu(OH)₂ de ~ 1 μm. Luego de la transformación a CuO en He, éstos conservaron su morfología, pero la misma se perdió parcialmente tras el ensayo catalítico. Los resultados observados permiten analizar el proceso inicial de desarrollo de la capa de la película, lo cual es fundamental para comprender la relación sinérgica entre los óxidos y su desempeño catalítico.

[1] A. Cabello, M. Ulla, J. Zamaro; Top. Catal. 62 (2019) 931.

[2] A. Cabello, M. Ulla, J. Zamaro; J. Mater. Sci. 57 (2022) 12797.

[3] A. Cabello, M.A. Franco, M. Ulla, J. Zamaro; Catalysts 13 (2023) 932.



**IDENTIFICACIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS IGUALES O CUASI IGUALES
MEDIANTE EL CÁLCULO DE DISTANCIAS Y ÁNGULOS. UNA HERRAMIENTA
FUNDAMENTAL EN LA PREDICCIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS**

K.N. Varela^{1,2*}, G.I. Pagola^{1,2}, M.B. Ferraro^{1,2}, A.M. Lund³, A.M. Orendt⁴, J.C. Facelli³

¹Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Física. Bs As.

²CONICET - Universidad de Buenos Aires, Instituto de Física de Buenos Aires (IFIBA). Buenos Aires

³Department of Biomedical Informatics, The University of Utah. Salt Lake City, Utah. USA Utah, USA

⁴Center for High Performance Computing, The University of Utah. Salt Lake City.

*kristalvarelamuzzati@gmail.com

Palabras claves: PREDICCIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS; ALGORITMO GENÉTICO; DIVERSIDAD ESTRUCTURAL

La tarea de poder identificar estructuras cristalinas idénticas es de suma importancia en el campo de la Predicción de Estructuras Cristalinas (CSP por sus siglas en inglés). Mediante el uso de algoritmos genéticos (GA por sus siglas en inglés), miles de posibles estructuras cristalinas son generadas y optimizadas según su energía con el fin de explorar el gran número configuraciones que una molécula puede adoptar y así encontrar la configuración de mínima energía que implica un gran espacio de búsqueda. Durante este proceso muchas estructuras convergen hacia la misma configuración, lo que origina un estancamiento en la evolución del GA debido a la pérdida de diversidad, ocasionando que un set de estructuras candidatas domine la población, con una consecuente pérdida de productividad y profundidad de búsqueda [1][2]. De esto surge la necesidad de implementar un algoritmo para comparar y eliminar estructuras duplicadas (o cuasi duplicadas), con el fin de garantizar la diversidad en la lista de los principales candidatos y, al mismo tiempo, mantiene un grupo variado de configuraciones en la población. Por lo que hemos desarrollado un algoritmo que calcula y compara directamente distancias y ángulos (figura 1) entre estructuras, permitiendo identificar si son idénticas (dentro de ciertos parámetros) seleccionando aquella de menor energía y/o mayor simetría para ser incorporada a la lista de mejores candidatos. Este código ha sido integrado al algoritmo de predicción de estructuras cristalinas MGAC (Modified Genetic Algorithm for Crystals). Esta actualización ha mejorado la productividad y eficiencia del algoritmo permitiendo predecir exitosamente las estructuras cristalinas del metanol, etanol, butanol, etc., poniendo en evidencia el potencial de nuestro método como técnica necesaria y complementaria para la eficiencia durante la predicción de estructuras cristalinas.

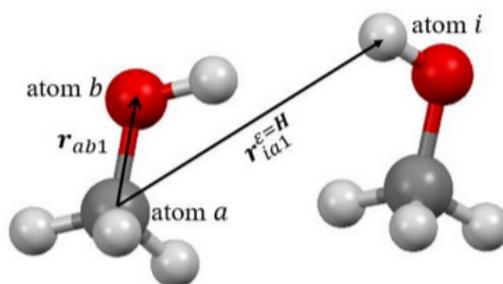


Figura 1. Diagrama del cálculo y comparación de ángulos para la comparación de estructuras.

[1] S.Y. Chen, F. Zheng, S.Q. Wu, and Z.Z. Zhu, Curr. Appl. Phys. 17 (2017) 454-460.

[2] J. A. Chisholm and S. Motherwell. J. Appl. Cryst. 38 (2005) 228-231.



FASES TOPOLÓGICAS EN SISTEMAS MAGNÉTICOS

F.A. Gómez Albarracín^{1*}, H.D. Rosales¹

¹*Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (CONICET-UNLP) - Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

**albarrac@fisica.unlp.edu.ar*

Palabras claves: TOPOLOGÍA; SIMULACIONES; MAGNETISMO; FACTOR DE ESTRUCTURA

En el marco de los Casos Científicos agrupados en el libro “Técnicas neutrónicas para la ciencia argentina y latinoamericana” del Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones, presentamos nuestra línea de investigación de fases topológicamente no triviales en sistemas magnéticos (clásicos), donde buscamos vincular nuestros análisis teóricos, numéricos y de simulaciones computacionales con observables contrastables con experimentos. En esta línea nos centramos especialmente en skyrmiones, texturas magnéticas de escala nanomagnética caracterizados por un enrollamiento de los momentos magnéticos en el espacio real, y por un invariante topológico (carga topológica). Los skyrmiones fueron detectados experimentalmente por primera vez en el helimagneto MnSi [1], donde medidas de dispersión de neutrones elástico mostraron la presencia de la llamada fase “triple-q”, de tres picos de Bragg no equivalentes, consistente con un arreglo periódico de skyrmiones. Esta medición es clave, ya que es contrastable con el factor de estructura calculado sobre texturas de espines obtenidas con simulaciones.

Aquí presentamos el caso de MnSc₂S₄ [2,3], donde hemos trabajado en colaboración con el grupo experimental de la Dra. Zaharko del Paul Scherrer Institute (PSI). Mostramos cómo combinando aproximaciones analíticas y simulaciones de Monte Carlo de alto desempeño con datos experimentales de dispersión de neutrones se ha podido definir un modelo efectivo y determinar la presencia de redes antiferromagnéticas de skyrmiones en MnSc₂S₄ en presencia de un campo magnético externo, y su comportamiento bajo diferentes inclinaciones de este campo.

Además, exponemos nuestra reciente colaboración con PSI para mejorar el modelo efectivo del material TmAgGe, formado por apilamiento de redes bidimensionales de kagome distorsionadas. En este caso, propusimos un nuevo modelo magnético para este material, con fuerte anisotropía local (espines efectivos tipo Ising) incluyendo diferentes alcances en las interacciones en la red de kagome. A través de simulaciones numéricas, hemos podido reproducir medidas experimentales de magnetización previas y, fundamentalmente, órdenes magnéticos compatibles con nuevas medidas de dispersión de neutrones elásticos. Adicionalmente, el modelo fue utilizado para cálculos dinámicos, que mostraron ser compatibles con mediciones de dispersión de neutrones inelástica.

[1] S. Mühlbauer et al., Science 323 (2009) 915-919.

[2] S. Gao, H.D. Rosales, F.A. Gómez Albarracín et al., Nature 586 (2020) 37-41.

[3] H.D. Rosales, F.A. Gómez Albarracín, K. Guratinder, V. Tsurkan, L. Prodan, E. Ressouche, and O. Zaharko., Phys. Rev. B 105 (2022) 224402.

[4] C.B. Larsen, D.G. Mazzone, N. Gauthier, H.D. Rosales, F.A. Gómez Albarracín, J. Lass, X. Boraley, S.L. Bud'ko, P.C. Canfield, O. Zaharko, Phys. Rev. B 107 (2023) 224419.



**COMISIÓN DE GÉNERO Y NO DISCRIMINACIÓN DE LA AACr
RESULTADOS Y PERSPECTIVAS A 5 AÑOS DE SU CREACIÓN**

L. Toscani^{1*}, H. Saraceni², P.C. Rivas Rojas¹, M.C. Gardey Merino³ y F. Movilla⁴

¹Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, ECyT, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Buenos Aires

²Departamento Caracterización de Materiales, CAB-CNEA

³División Separación Isotópica, CTP, CAB-CNEA

⁴DQIAQF, FCEyN, UBA / CONICET-INQUIMAE, FCEyN, UBA

*aacr.genero@gmail.com

Palabras claves: COMISIÓN DE GÉNERO Y NO DISCRIMINACIÓN; ENCUESTA; GENERO, VIOLENCIA LABORAL

La Comisión de Género y No Discriminación (CGND) de la AACr, nace en 2019 durante la XV Reunión Anual como respuesta a la necesidad de contar con un espacio específico para abordar temas referidos a situaciones generadas por cuestiones de género, jerarquía, etnia, religión o cualquier otro causal de discriminación en el que estén involucrados miembros de la Asociación o afines.

La CGND se conforma desde sus inicios por postulaciones voluntarias, buscando mantener un balance federal. La modalidad de trabajo consiste en reuniones periódicas durante las cuales se discuten y ejecutan estrategias para el relevamiento de información, tanto del panorama actualizado de la diversidad de personas que componen nuestra Asociación, así como de posibles situaciones de violencia o discriminación que puedan ocurrir entre ellas. En este sentido, busca impulsar un espacio de confianza, contención y respeto hacia la privacidad e integridad de cada persona y de asesoramiento respecto de protocolos ya existentes en las instituciones a las que pertenecen lxs miembros de nuestra asociación.

Hoy, a 5 años de la generación de este nuevo espacio por parte de la Comisión Directiva, mostraremos el camino recorrido y la situación actual de la Asociación reflejada en los resultados de la última encuesta (Figura 1), la distribución poblacional en términos de edades, género autopercebido, posición jerárquica y conocimiento de los protocolos vigentes antes situaciones de violencia laboral y de género.

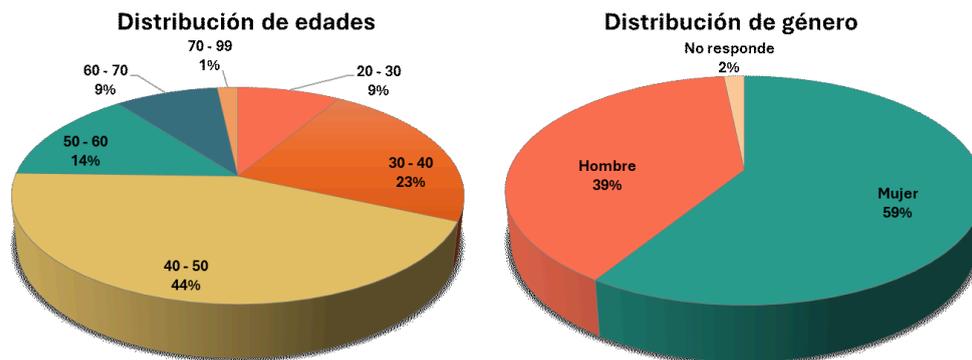


Figura 1. Distribución poblacional en edades y géneros autopercebidos entre los miembros de la AACr, extraída de los resultados de la última encuesta.

Reforzamos la invitación a comprometerse con las políticas de no discriminación promovidas por esta comisión, las cuales promueven ambientes de trabajo sanos y motivadores, al garantizar el respeto mutuo y la inclusión. Esto va en concordancia con los códigos de conducta de instituciones referentes internacionales [1] y de los principios básicos de bienestar y derechos humanos.

[1] <https://www.iucr.org/iucr/governance/advisory-committees/gedc>



NANOPARTÍCULAS HÍBRIDAS EPITAXIALES CON ESTRUCTURA ESPINELA: ESTABILIDAD Y GRADIENTES DE COMPOSICIÓN CATIONICA

G.C. Lavorato^{1*}, F. Ali¹, A. Floridia², J.M. Orozco-Henao¹, C.A. Ospina Ramírez³, D. Muraca⁴, C. Vericat¹,
M. Fonticelli¹

¹Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CONICET-UNLP), La Plata

²YPF TECNOLOGIA S.A., Av. Del Petróleo s/n, Berisso

³Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano), CNPEM, Campinas, SP, Brasil

⁴Instituto de Física “Gleb Wataghin” - Universidade de Campinas, Campinas, SP, Brasil

*gabriel.lavorato@ing.unlp.edu.ar

Palabras claves: ESPINELA; DIFUSIÓN CATIONICA; NANOPARTÍCULAS HÍBRIDAS

La combinación de óxidos con estructura espinela en nanopartículas híbridas (HNPs) epitaxiales ha permitido en los últimos años optimizar materiales para electrocatálisis y potenciar su respuesta magnética para aplicaciones biomédicas. A pesar de ello, su desempeño está limitado por transformaciones estructurales asociadas a reacciones redox y procesos de difusión cationica[1]. Las interfases en HNPs suelen exhibir gradientes de composición, tensiones o defectos que podrían modular las velocidades de reacción y la estabilidad de las fases presentes[2].

En este trabajo estudiamos NPs monodispersas de Fe_3O_4 de 12 nm y NPs de tipo “core/shell” $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ y $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{ZnFe}_2\text{O}_4$ de 18 nm. La correspondencia entre los parámetros de red de las espinelas permite preparar HNPs epitaxiales con interfases bien definidas. En primer lugar, se observó que el recubrimiento evita la oxidación de la Fe_3O_4 ($4\text{Fe}_3\text{O}_4 + \text{O}_2 \rightarrow 6\gamma\text{Fe}_2\text{O}_3$). A partir de tratamientos isotérmicos entre 250 y 300 °C en presencia de oxígeno, mostramos que en HNPs de $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ existe difusión de iones Co, dando lugar a nanocristales con un gradiente de Co y, en última instancia, a óxidos $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ de composición homogénea (Figura 1a). Para una mejor comprensión de las transformaciones redox en HNPs, realizamos experimentos de microscopía electrónica de transmisión (TEM) *in situ* donde estudiamos mediante difracción de electrones, imágenes de alta resolución y mapeos de EDS la reducción de la Fe_3O_4 a FeO inducida bajo presiones de oxígeno reducidas ($\approx 10^{-7}$ mbar) y temperaturas hasta 800 °C (Figura 1b). Los resultados indican que la presencia de Co en el recubrimiento promueve la formación de dominios metálicos de Fe(Co) y la coalescencia de las HNPs, mientras que el Zn estabiliza la estructura espinela, retrasando su reducción y previniendo la agregación de los nanocristales. Los resultados obtenidos ponen en evidencia los factores que modulan la estabilidad química de las espinelas y representan una nueva estrategia para diseñar óxidos nanoestructurados con gradientes de composición cationica.

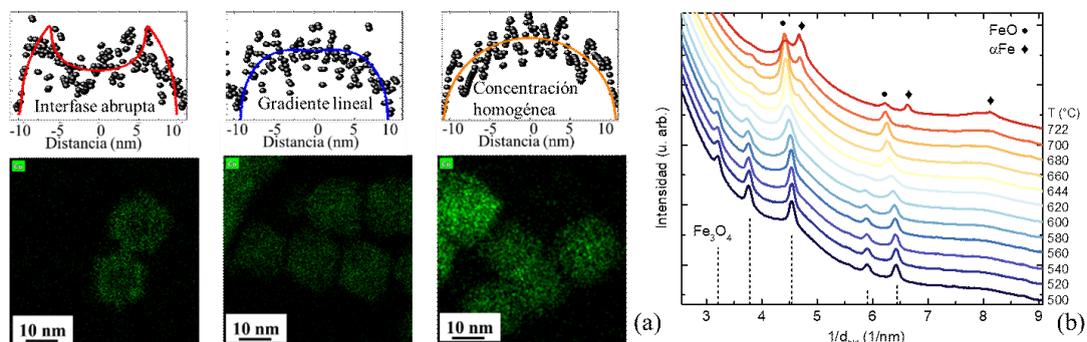


Figura 1. (a) Mapeos EDS y perfiles de composición de Co para NPs híbridas $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ antes (izquierda) y después de un tratamiento térmico a 250 °C (centro) y 300 °C (derecha) en presencia de oxígeno. (b) Evolución del patrón de difracción de electrones *in situ* para NPs de Fe_3O_4 en función de la temperatura.

[1] G.C. Lavorato, A.A. de Almeida, C. Vericat, M.H. Fonticelli, Nanotechnology 34 (2023) 192001.

[2] M.A. Roldán et al., Chem. Eng. J. 405 (2021) 126820.

CONTRIBUCIONES MURALES

por orden alfabético de primer autor



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



STRUCTURAL-BIOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF THE MALOLACTIC ENZYME OF STREPTOCOCCUS MUTANS

V. Abratti Bogdanich^{1*}, M.N. Lisa² y C.E. Alvarez¹

¹*Centro de Estudios Fotosintéticos y Bioquímicos (CEFOTI- CONICET), FBIOyF, UNR, 2000 Rosario*

²*Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR), Ocampo y Esmeralda, Rosario S2002LRK*

**valentina.abratti@gmail.com*

Palabras clave: MALOLACTIC FERMENTATION; CRYSTAL STRUCTURE; OPTIMISED PROTOCOL

Most lactic acid bacteria (LAB) catalyze the decarboxylation of L-malate to L-lactate through a malolactic enzyme (MLE) that is dependent on NAD⁺ and Mn²⁺. This enzyme plays a crucial role in malolactic fermentation (MLF), a secondary fermentation process that occurs when L-malate and acidity are present. MLF enables the bacteria to prevent cytosolic acidification and establish a pH gradient across the cell membrane, driving ATP synthesis. This process is essential in the industrial production of wines, ciders, cheeses, and yogurts, enhancing the nutritional and organoleptic properties of the final products. Additionally, MLF impacts human health as part of the physiology of *Streptococcus mutans*, the bacterium responsible for dental caries, where MLF is considered a virulence factor. Currently, MLF is a spontaneous and difficult-to-control phenomenon, primarily due to the lack of information on the biochemical properties of MLE. Identifying the conditions and/or molecular components that modulate MLE activity could transform this fermentation into a controlled process. In this study, we present an optimized protocol to obtain MLE from *S. mutans* (SmMLE) without co-purification with other similar proteins, such as endogenous malic enzyme, which could interfere with its characterization. We used a codon-optimized SmMLE coding sequence cloned into the pET-22 vector to express the recombinant protein in *E. coli*. The pET-22 vector carries a signal peptide that allows the export of the recombinant SmMLE to the periplasm, thus separating the protein to be purified from the host's cytoplasmic proteins. With this protein, we obtained the first crystal structure of SmMLE in a quaternary complex with NAD⁺, Mn²⁺, and pyruvate, revealing a dimeric conformation where Mn²⁺ is present at two distinct sites: the active site and the dimeric interface. We also optimized a method to measure the enzyme's activity, which will allow us to evaluate different modulators of its catalytic activity in the future. These results provide a good starting point for understanding MLE specialization and for developing ligand binding based strategies to modulate enzyme activity.



**SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA CON MACLAS:
DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN**

F.L. Ali^{1*}, J.C. Azcárate², C. Vericat¹, M.H. Fonticelli¹, G.C. Lavorato¹

¹Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Universidad Nacional de La Plata - CONICET, Diagonal 113 y 64 S/N, 1900 La Plata, Buenos Aires

²Centro Atómico Bariloche (CAB), Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) - CONICET, Av. Bustillo 9500, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro

*franciscoali@inifta.unlp.edu.ar

Palabras claves: NANOPARTÍCULAS; MAGNETITA; MACLAS; MICROSCOPIA ELECTRÓNICA

Los nanocristales de magnetita son empleados ampliamente como modelo de estudio para investigar las propiedades de sistemas magnéticos nanoestructurados, con numerosas aplicaciones en biomedicina, remediación ambiental y catálisis. Se ha estudiado la dependencia de las propiedades magnéticas tales como la coercitividad respecto de distintos factores como el tamaño y forma de las partículas, o el grado de oxidación[1]. Recientemente, se ha evidenciado que la presencia de defectos en los nanocristales de óxidos de hierro (FeOx) también es una variable que puede emplearse para ajustar su comportamiento, incluso mejorando su desempeño en las aplicaciones[2]. Sin embargo, el problema subyace en el diseño de un método reproducible de síntesis de nanocristales de FeOx con defectos.

En este trabajo se describe la síntesis de nanocristales de FeOx con maclas, basada en un protocolo reportado previamente[3]. La síntesis se llevó a cabo mediante descomposición térmica de acetilacetonato de hierro (Fe(acac)₃) en medio orgánico en presencia de ácido oleico (OA), una técnica que en la literatura se emplea en general para obtener nanocristales monocristalinos y con baja polidispersidad, pero que en presencia de un ligando voluminoso como el bromuro de didodecildimetilamonio (DDAB) da lugar a nanocristales con una alta densidad de defectos, mayormente maclas de contacto. Las muestras sintetizadas fueron caracterizadas mediante microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) y difracción de electrones (SAED).

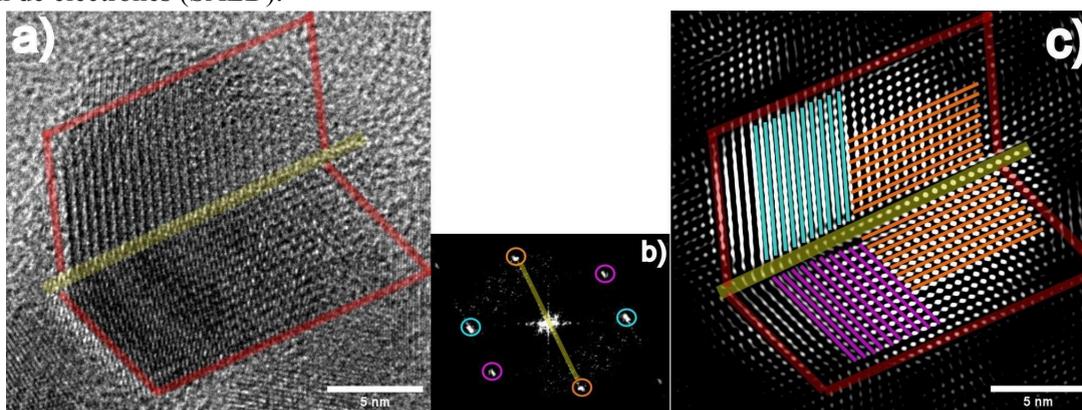


Figura 1. a) Imagen HRTEM de un nanocristal de magnetita sintetizado en presencia de OA y DDAB, con la macla de contacto resaltada en amarillo y el contorno en rojo. b) Imagen FFT adquirida a partir de 1a. c) Imagen FFT inversa producida a partir de las reflexiones señaladas en 1b pertenecientes a la familia de planos {111}.

[1] G.C. Lavorato, A.A. de Almeida, C. Vericat, M.H. Fonticelli, *Nanotechnology* 34 (2023) 192001. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/acb943>

[2] A. Lak, S. Disch, P. Bender, *Adv. Sci.* 8 (2021) 2002682-2002696. <https://doi.org/10.1002/advs.202002682>

[3] B.H. McDonagh, C. Staudinger, P.S. Normile, J.A. De Toro, S. Bandyopadhyay, W.R. Glomm, G. Singh, *Appl. Mater. Today* 24 (2021) 101084. <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2021.101084>



CARACTERIZACIÓN DE *SITIOS ETANOFÍLICOS* EN EL AFINAMIENTO DE ESTRUCTURAS ASISTIDO POR DINÁMICA MOLECULAR

H.A. Alvarez^{1,2,3*}, Y.R. Espinosa Silva^{1,4}, A. Cousido-Siah⁵, C.M. Carlevaro^{1,6}, E.I. Howard^{1,7}

¹Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (UNLP-CONICET)

²Departamento de Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)

³Instituto de Ciencias de la Salud (UNAJ)

⁴Grupo de Investigación de Genética y Biología Molecular - Universidad de Pamplona (Colombia)

⁵Institut de génétique et de biologie moléculaire et cellulaire (IGBMC - Francia)

⁶Facultad Regional La Plata, UTN

⁷Facultad Regional Tierra del Fuego, UTN

*aariel@iflysib.unlp.edu.ar

Palabras claves: SOLVATACIÓN DE PROTEÍNAS; CRISTALOGRAFÍA DE MACROMOLÉCULAS; DINÁMICA MOLECULAR; ETANOL

Es bien conocido que el solvente tiene un papel fundamental para garantizar la estabilidad, conformación y actividad de macromoléculas. Las técnicas de Difracción han permitido una descripción a nivel atómico de la primera capa de solvatación proteica. El cristal a difractar se obtiene en un licor madre que contiene una gran variedad de solutos. Sin embargo, salvo excepciones bien definidas, se suele atribuir moléculas de agua a las distintas densidades electrónicas observadas alrededor de la proteína, dificultando el estudio de las propiedades de esta capa de solvatación.

La simulación por Dinámica Molecular (DM) de cristales [1,2] nos permite acceder a una descripción de la identidad atómica de esas densidades a la vez que muestra la complejidad del comportamiento del solvente en esa zona. En un trabajo previo [2], observamos la presencia de etanol en el entorno de la proteína hFABP humana. Para confirmar esta observación, estudiamos por Difracción de RX cristales de esa proteína que fueron sumergidos (*soaking*) en soluciones de diferentes concentraciones de etanol. También llevamos a cabo simulaciones por DM de un cristal de la misma proteína, explorando diferentes campos de fuerza, en busca de aquel que mejor describa nuestras observaciones experimentales. Las simulaciones por DM mostraron la capacidad de predecir sitios de ocupación del etanol, que fueron confirmados por los resultados experimentales (Figura 1), aun en casos en que la ocupación es parcial. Los hemos llamado *sitios etanofílicos*, y en el trabajo presentaremos sus características, basados en las observaciones experimentales y de simulación.

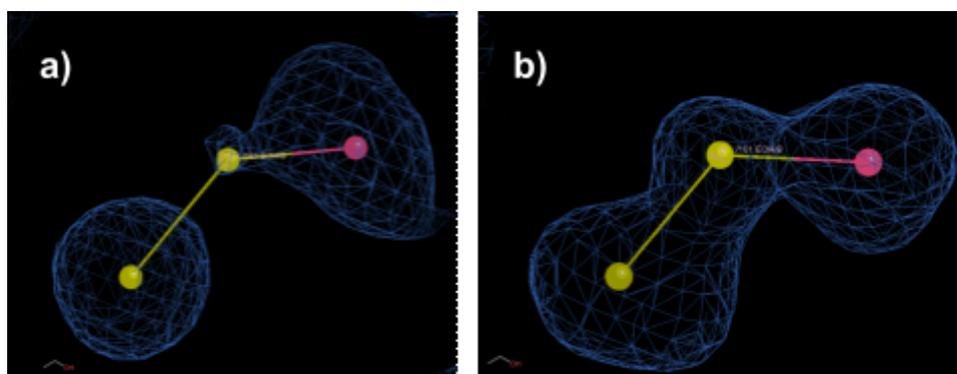


Fig. 1. Mapa 2Fo-Fc de un sitio parcialmente ocupado por etanol y agua (no incluida en la figura). a) Sitio presente en un cristal incubado con 6% V/V etanol y b) mismo tipo de cristal incubado con 40% V/V etanol.

[1] Y.R. Espinosa et al., J. Biomol. Struct. Dyn. 39 (2021) 3459-3468. <https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1773315>

[2] H.A. Alvarez, A. Cousido-Siah et al., Proteins: Struct. Funct. Bioinf. 91 (2023) 1525-1534. <https://doi.org/10.1002/prot.26546>



**EFFECTO DEL ÓXIDO DE MANGANESO Y DE COBRE EN EL PROCESO DE
CRISTALIZACIÓN DE MULLITA A PARTIR DE ARCILLA-ALÚMINA**

R.J. Anaya^{1,2}, P.V. López^{1,2}, I. Polcowñuk^{1,2}, M.F. Hernández^{1,2}, A. Mocciaro^{1*}, D. Richard^{1,2}, M.S. Conconi^{1,2}, N.M. Rendtorff^{1,2}

¹ CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CONICET La Plata - CIC PBA - UNLP), M. B. Gonnert, Buenos Aires

² Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Buenos Aires

*anamocciaro@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras claves: MULLITA; RIETVELD; REFRACTARIO

La mullita ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$) es un material refractario ampliamente utilizado por sus propiedades mecánicas, termomecánicas y químicas. Se utiliza ampliamente en la producción de materiales resistentes al calor, en aislamiento térmico, soporte de catalizadores, etc. [1]. Para mejorar el proceso general de mullitización, se pueden incorporar cationes de metales de transición como dopantes en la estructura de mullita en diferentes proporciones.

En este trabajo se estudió el efecto de la adición (hasta 10 % p/p) de los óxidos de manganeso y de cobre (MnO_2 y CuO) en la formación de mullita estequiométrica a partir de una arcilla caolinítica nacional y alúmina, utilizando tratamientos térmicos de 1400-1500 °C. Se analizaron las fases cristalinas y no cristalinas por medio de difracción de rayos X de polvos, se realizaron refinamientos por el método de Rietveld [2] y se modeló la fase no cristalina con la aproximación de Le Bail [3], el refinamiento permitió determinar la cuantificación de fases cristalinas y no cristalinas, y las constantes de celda. Además, se estudió el efecto de la incorporación de los óxidos en los procesos termoquímicos de la arcilla (deshidroxilación y formación de mullita) mediante análisis termogravimétrico y termodiferencial y dilatométrico, se determinaron las propiedades texturales (densidad y porosidad) por el método Arquímedes y se observó la microestructura por microscopía electrónica de barrido.

Se obtuvieron materiales con mullita como fase mayoritaria, y no se identificaron fases cristalinas relacionadas con el óxido de manganeso y de cobre, por lo que estos elementos podrían estar presentes en la fase no cristalina y/o disueltos en la estructura de la mullita. Se observó en la curva del análisis térmico diferencial que la incorporación de los óxidos influye en el proceso de mullitización y no así en el proceso de deshidroxilación. Estos resultados son una primera aproximación para el diseño y fabricación de tuberías cerámicas refractarias basadas en mullita, en busca de mejorar su desempeño en intercambiadores de calor a altas temperaturas y con sales fundidas como fluido de trabajo.

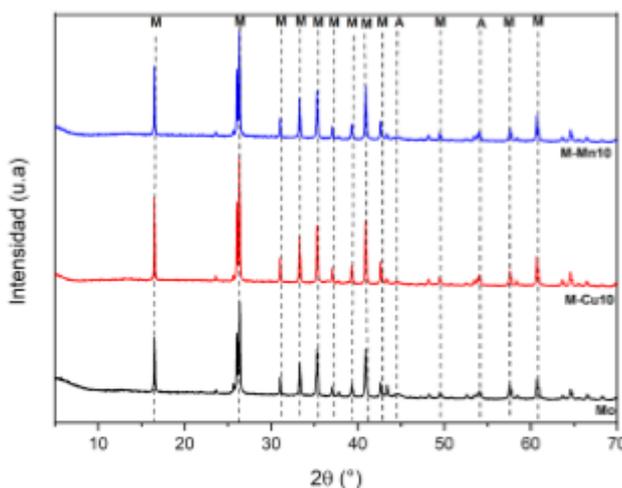


Fig. 1. Diagrama de rayos x calcinados a 1500 °C de la muestra sin adición de óxidos (Mo) y con 10 % p/p de adición de CuO (M-Cu10) y MnO_2 (M-Mn10).

[1] H. Schneider, R.X. Fischer, and J. Schreuer, J. Mullite, J. Am. Ceram. Soc. 98 (2015) 2948-2967. <https://doi.org/10.1111/jace.13817>

[2] R.A Young, The Rietveld Method. IUCr, Oxford University Press, 298. New York (1993).

[3] Le Bail, J. Non-Cryst. Solids 183 (1995) 39-42. [https://doi.org/10.1016/0022-3093\(94\)00664-4](https://doi.org/10.1016/0022-3093(94)00664-4)



**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PEROVSKITAS SIMPLES Y DOBLES DE
 $\text{Sr}_2(\text{Fe,Ni,Mo})_2\text{O}_{6-\delta}$ PARA SU USO COMO ELECTRODOS EN
CELIDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO**

M.B. Arcentales^{1*}, L. Toscani¹, S. Figueroa², D. Lamas¹

¹Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas, CONICET-UNSAM, Laboratorio de Cristalografía Aplicada-Pcia. de Buenos Aires

²Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS), Brazilian Center for Research in Energy and Materials (CNPEM), Brazil

*marcentalesvera@unsam.edu.ar

Palabras claves: SOFC; PEROVSKITA; COMBUSTIBLE; CÁTODOS

El desarrollo de fuentes de energías limpias y sostenibles para mitigar la contaminación ambiental es uno de los principales retos en la actualidad. En este contexto, las celdas de combustible han emergido como una tecnología más limpia para la conversión de energía química en energía eléctrica. Sin embargo, la mayoría de los cátodos empleados para celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia (IT-SOFCs) están basados en cobalto, un elemento asociado con altos costos y problemas de toxicidad [1]. Por ello, se propone el estudio de nuevos materiales catódicos compuestos por elementos como hierro (Fe) y molibdeno (Mo), que presentan menor costo y son de interés debido a su capacidad para formar compuestos con propiedades de conductividad iónica y electrónica mixta (MIECs) [2,3].

En este estudio, se ha sintetizado una serie de compuestos $\text{Sr}_2\text{Fe}_{2-x}\text{Mo}_x\text{O}_{6-\delta}$ ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5$) mediante el método de gel-combustión. Además, se ha conseguido estabilizar la estructura de la doble perovskita mediante dopaje con níquel (Ni). En particular, se observó que en una muestra con deficiencia en el sitio B, los picos característicos de la doble perovskita presentaban una mayor intensidad, lo que sugiere un mayor orden en la disposición atómica en dicho sitio. Este trabajo permitirá comprender el efecto de la sustitución parcial de Fe por Ni en la estructura cristalina, la expansión térmica, las propiedades electroquímicas y la conductividad del material.

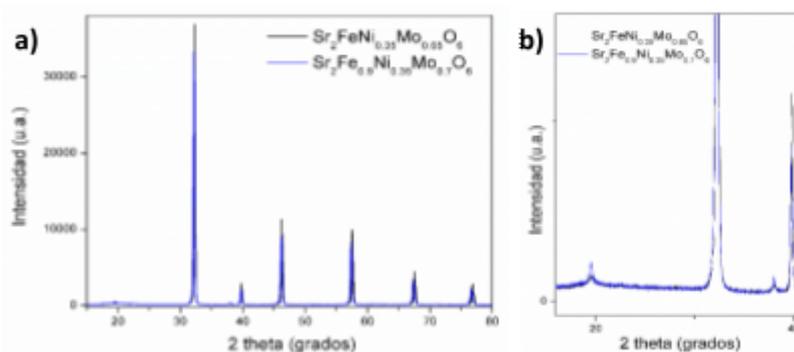


Figura 1. Caracterización por difracción de rayos X de perovskitas SFMO dopadas con Ni **a)** Difractograma de muestra $\text{Sr}_2\text{FeNi}_{0.35}\text{Mo}_{0.65}\text{O}_{6-\delta}$ (negro) y de muestra con deficiencia en el sitio B $\text{Sr}_2\text{Fe}_{0.9}\text{Ni}_{0.35}\text{Mo}_{0.7}\text{O}_{6-\delta}$ (azul) **b)** ampliación de a) donde se aprecian los picos a 19 y 38° característicos de la doble perovskita SFNMO

[1] S.W.D. Gourley, T. Or y Z. Chen, iScience 23 (2020) 101505.

[2] Q. Liu, X. Dong, G. Xiao, F. Zhao, F. Chen, Adv. Mater 22 (2010) 5478.

[3] S.S. Hashim, F. Liang, W. Zhou y J. Sunarso, ChemElectroChem 6 (2019) 3549-3569.



CRECIMIENTO DE PELÍCULAS DELGADAS DE $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ POR DEPOSICIÓN LÁSER PULSADO Y SU CARACTERIZACIÓN PARA ELECTRODOS DE CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO

E. Asto*¹, D.G. Lamas¹, C. Huck-Iriart², J. Santiso³

¹Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas, CONICET-UNSAM, Laboratorio de Cristalografía Aplicada- Av. 25 de mayo 1169, (1650) General San Martín, Pcia. de Buenos Aires

²Sincrotrón ALBA, Carrer de la Llum, 2, 26, 08290 Cerdanyola del Vallès, Barcelona, España

³Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2), 08193 Bellaterra, Barcelona, España

*eastoramos@unsam.edu.ar

Palabras claves: HRXRD; SOFCs; XAS; PELÍCULAS DELGADAS; PLD

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFCs) se han convertido en uno de los dispositivos de conversión de energía más atractivos debido a su flexibilidad de combustible, su respeto al medio ambiente y su eficiencia en la conversión de energía. Sin embargo, la alta temperatura de funcionamiento (normalmente superior a 800 °C) de las SOFCs plantea algunos desafíos relacionados con la estabilidad, la integridad del sellado y la seguridad. Reducir la temperatura de funcionamiento de las SOFC a 600 °C o menos se ha convertido en un importante foco de investigación en este campo. Un enfoque eficaz implica reducir el espesor del electrolito manteniendo una alta estabilidad y rendimiento a temperaturas más bajas [1]. Entre las tecnologías de preparación de películas delgadas, la deposición por láser pulsado (PLD) está ganando atención debido a las ventajas que ofrece en términos de control preciso sobre el espesor, la composición y la cristalinidad de la película.

En este trabajo, se depositó un conjunto de películas delgadas epitaxiales de $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ (STF) ($x = 0,3, 0,4, 0,6$) y Ceria dopada con Gadolinia (GDC) sobre un sustrato monocristalino de circonia estabilizada con itria (YSZ) con orientación (001). La síntesis de las películas delgadas se realizó mediante PLD se realizaron a 800 °C bajo un flujo de oxígeno controlado [2]. La estructura cristalina y el estado de deformación se analizaron mediante difracción de rayos X de alta resolución (HRXRD), absorción de rayos X (XAS) y técnicas complementarias.

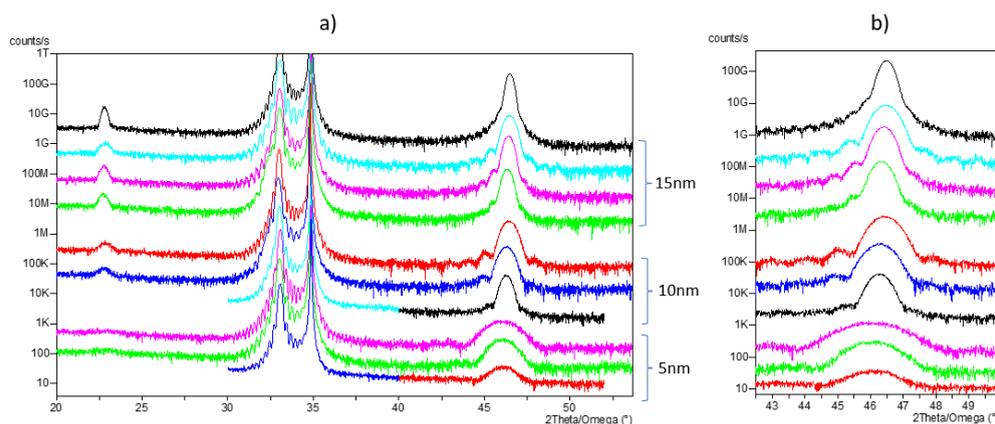


Figura 1. Difracción de rayos X de alta resolución omega-2theta de películas delgadas con a) espesores 5, 10, 15 nm depositadas sobre el electrodo GDC de espesor 30nm, y b) detalles del plano de reflexión 002.

[1] W. Jung, H.L. Tuller, J. Electrochem. Soc. 155 (2008) B1194.

[2] N.A. Shepelin, Z.P. Tehrani, N. Ohannessian, C.W. Schneider, D. Pergolesi, T. Lippert, Chem. Soc. Rev. 52 (2023) 2294-2321.



NUEVOS HALOARIL-GALACTÓSIDOS: ESTUDIO ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCÓPICO

N. Bejarano^{1*}, J. Esteche¹, O.E. Piro², G.A. Echeverría², C.C. Santiago¹, A. Ponzinibbio¹, M.F. Erben³

¹CEDECOR (CIC, UNLP). Departamento de Química. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. 1900. La Plata

²IFLP (CONICET, UNLP). Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. La Plata

³CEQUINOR (CONICET, UNLP). Departamento de Química. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. 1900. La Plata

*natividadbejarano@quimica.unlp.edu.ar

Palabras claves: CONFORMACIONES MOLECULARES; ESTRUCTURAS CRISTALINAS; NUEVOS GALACTÓSIDOS

La síntesis de nuevos azúcares es un área de gran interés en el estudio de los llamados glicomiméticos, en la química de productos naturales y en el desarrollo de moléculas orgánicas con potenciales aplicaciones terapéuticas [1]. Dentro de las diversas metodologías de preparación de nuevos derivados, la *N*-funcionalización en distintas posiciones ha recibido mucho interés en los últimos años [2]. Recientemente en nuestro laboratorio hemos logrado desarrollar un método eficiente de síntesis de 6-deoxi-6-*N*-haloaril-*D*-galactósidos. La determinación estructural inequívoca de estos compuestos requiere de un completo estudio espectroscópico y cristalográfico, para lo cual logramos cristalizar dos de las moléculas obtenidas y realizar una resolución estructural por DRX (Figura 1).

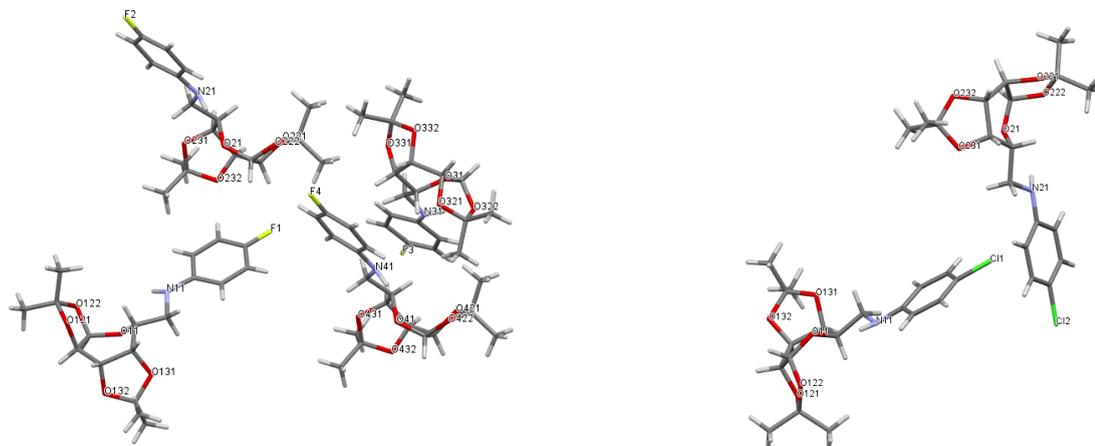


Figura 1. Estructuras moleculares resueltas por DRX de los derivados de la 6-deoxi-6-*N*-1,2:3,4-di-*O*-isopropiliden- α -*D*-galactopiranososa con sustituyentes *p*-cloro y *p*-fluoro arilos.

Ambas moléculas cristalizan en el sistema monoclinico, grupo espacial $P 2_1$ conteniendo 4 y 2 moléculas cristalográficamente independientes en la celda unidad respectivamente, que muestran diferencias sutiles desde el punto de vista conformacional. Las conformaciones moleculares se encuentran, en ambos casos, estabilizadas por una interacción intermolecular de enlaces de hidrógeno NH...O que involucra los grupos amino. Se realizó un estudio cristalográfico y espectroscópico para determinar la interrelación entre las conformaciones preferidas en estado sólido y las interacciones intermoleculares promovidas tanto por el anillo glicosídico como por el resto aglicona.

[1] V.K. Tiwari, TCR, 21 (2021) 3029-3048.

[2] H.E. Moser in Carbohydrates in Chemistry and Biology, Vol 2 (Eds. B. Ernst, G. W. Hart and P. Sinay), Wiley-VCH, 1095p. Weinheim 2000.



EVALUACIÓN DE FASES CRISTALINAS EN Fe-SILICALITA

M.R Biangardi^{1,2*}, A.M. Pereyra^{1,2}, M.S. Moreno³

¹CINDECA, (CONICET-CIC-UNLP), 47 N° 257, B1900 AJK, La Plata, Buenos Aires

²CITEMA, (CIC-UTN), 124 y 60, 1923, Berisso, Buenos Aires

³Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET), 8400, S.C. de Bariloche, Río Negro

*rosariobiangardi@gmail.com

Palabras claves: Fe-SILICALITA; MONOCLÍNICA; ORTORRÓMBICA; Fe ESTRUCTURAL

El presente trabajo tuvo como objetivo la evaluación de las fases cristalinas de la Fe-silicalita, zeolita de estructura tipo MFI (Movil Five), que se caracteriza por tener el Fe presente en sitios estructurales y formando oxihidróxidos de Fe en los canales y/o en la superficie.

El material se obtuvo utilizando una ruta de síntesis sol-gel a 170 °C durante 3 días. Luego, se eliminó el agente director de la estructura mediante un tratamiento térmico a 650 °C durante 4 h. A través de EAA se obtuvo que el porcentaje en peso de Fe que presenta la muestra es de 7,1%. Mediante DRX se caracterizaron las muestras con y sin tratamiento térmico. A partir del análisis de las imágenes de TEM de alta resolución (Fig. 1) se determinó la presencia de las fases ortorrómbica y monoclinica en la muestra calcinada, y de la fase monoclinica en la muestra sin calcinar.

Investigaciones previas en zeolitas del tipo ZSM-5 [1,2], han mostrado que la transición de la fase monoclinica a ortorrómbica ocurre a los 100 °C. Para Fe-silicalita con una relación Si/Fe mayor a 100, la fase estable es la monoclinica y por debajo de este valor se estabiliza la fase ortorrómbica. Por lo tanto, se puede inferir que la presencia de ambas fases indicaría una sustitución isomórfica inhomogénea del Fe en el material.

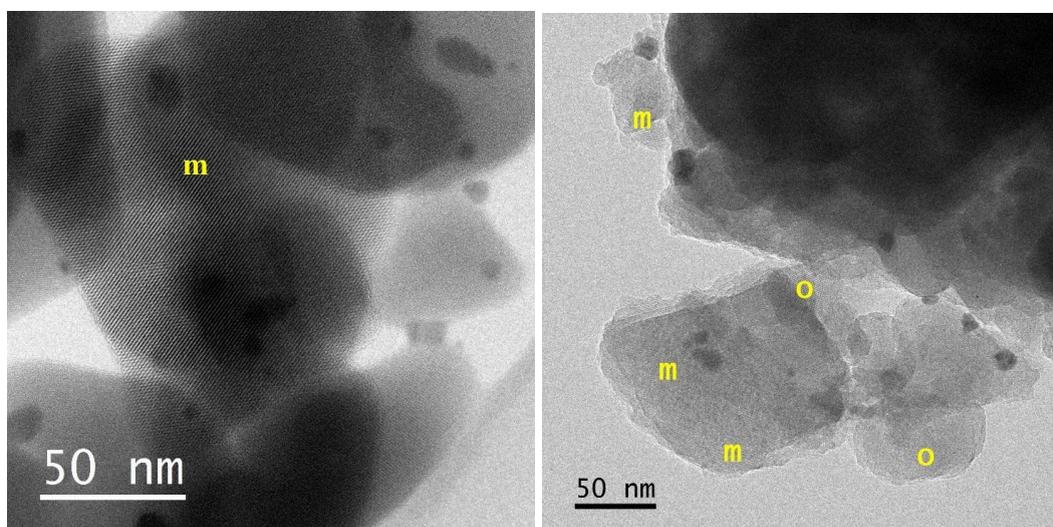


Figura 1. Imágenes de HRTEM de Fe-silicalita. Izq: muestra calcinada. Der: muestra sin calcinar. Se identifican cristales de las fases presentes: m (monoclinica) y o (ortorrómbica).

[1] N. Precisvalle et al., Crystals 13 (2023) 979-995.

[2] M. Ardit, A. Martucci, G. Cruciani, J. Phys. Chem. C 119 (2015) 7351–7359.



CLINOPTILOLITA EN LA FORMACIÓN CERRO AZUL, CARHUÉ, BUENOS AIRES
D.F. Block^{1*}, A.M. Blasi¹

¹MLP-CICPBA, Paseo del Bosque s/n, La Plata, Buenos Aires

*diegofblock@fcnym.unlp.edu.ar

Palabras claves: CLINOPTILOLITA; FORMACIÓN CERRO AZUL; BUENOS AIRES

Se presentan resultados del análisis mineralógico de la fracción arcilla de sedimentos asignados a la Formación Cerro Azul (FCA), en el partido de Adolfo Alsina, Oeste de la provincia de Buenos Aires. La FCA constituye parte importante del registro de sedimentación continental neógena extra andina de la región central del país [1].

En las barrancas lindantes a la laguna de Epecuén, afloran unidades con estructuras sedimentarias como laminación heterolítica, y procesos postdeposicionales muy intensos como biotubación, pedogénesis y carbonatación, dando como resultado la conformación de paleosuelos poligenéticos [2].

La composición de la sucesión tiene un significativo carácter volcánico-clástico, siendo las trizas vítreas un componente destacado. El análisis mineralógico de la fracción arcilla muestra la presencia de esmectitas junto con clinoptilolita, una zeolita natural, que se forma a partir de la alteración del vidrio volcánico en ambiente lacustre-palustre, en cuerpos de aguas someros, alcalinas, en ambientes semiáridos, [3].

Los análisis se efectuaron en la División Mineralogía, Petrología y Sedimentología del Museo de la Plata, que cuenta con un difractómetro Panalytical modelo AERIS, radiación de Cu y filtro de Ni. Las condiciones de medida fueron 40 kv y 15 mA.

Estos resultados en conjunción con los análisis sedimentológicos permiten avanzar en la comprensión de la génesis de las sucesiones del Cenozoico Tardío en el Oeste bonaerense.

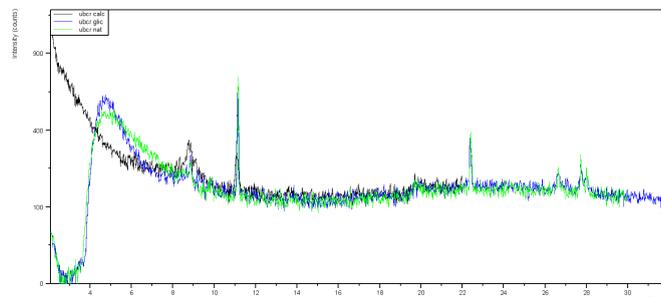


Figura 1. Difractograma de la fracción arcilla de la FCA.

[1] A. Folguera, M.A. Zárate, Rev. Asoc. Geol. Argent. 64 (2009) 692-712

[2] D. Block, Y. Rico, A. Blasi, L.E. Cruz, R. Bonini, L. Cantil, M. Fernández, J.C. Fernicola, C. Castiñeira Latorre, L. Rasia, L. Sarzetti, M.V. Sanchez. 2023. XVIII Reunión Argentina de Sedimentología : IX Congreso Latinoamericano de Sedimentología, La Plata 2023. Pp. 270.

[3] A.M. Iñiguez Rodríguez, P. E. Zalba , J. H. Maggi. X Congreso Geológico Argentino. Tucumán, 1987. pp:75-78.



**CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE UN INTERMEDIARIO SINTÉTICO AVANZADO
HACIA EL PRODUCTO NATURAL 5-BENZOIL-9-DEMETOXIAAPTAMINA**

S.J. Bolívar Ávila¹, A. Santarelli^{1,2*}, T.S. Kaufman^{1,2}, S.A. Testero^{1,2}, E.L. Larghi^{1,2}, G.N. Ledesma¹

¹Instituto de Química Rosario (IQUIR, CONICET-UNR), Fac. de Cs. Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531, Rosario

²Fac. de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531, Rosario

*santarelli@iquir-conicet.gov.ar

Palabras claves: AAPTAMINA; PRODUCTOS NATURALES; ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL

Los aaptaminoides son un selecto grupo de sustancias aisladas de esponjas marinas del género *Aptos*. Su condensada estructura y destacada bioactividad los convierten en un blanco sintético de importante actualidad, tanto desde la perspectiva de la química preparativa de productos naturales como desde el enfoque de la química medicinal [1]. En esta oportunidad, se presenta la síntesis del compuesto 2 partiendo de eugenol (1), un producto comercialmente asequible, y se describe particularmente la caracterización de este intermediario avanzado en la ruta hacia 5-benzoil-9-demetoxiaaptamina (3). Dicha caracterización incluye técnicas como la espectroscopía vibracional (IR) y espectroscopía de RMN de ¹H y ¹³C, complementadas con técnicas bidimensionales (HSQC, HMBC) [1,2]. Asimismo, se informa la estructura cristalina de 2, determinada mediante difracción de rayos X de monocristal, lo que permitió confirmar la propuesta estructural.

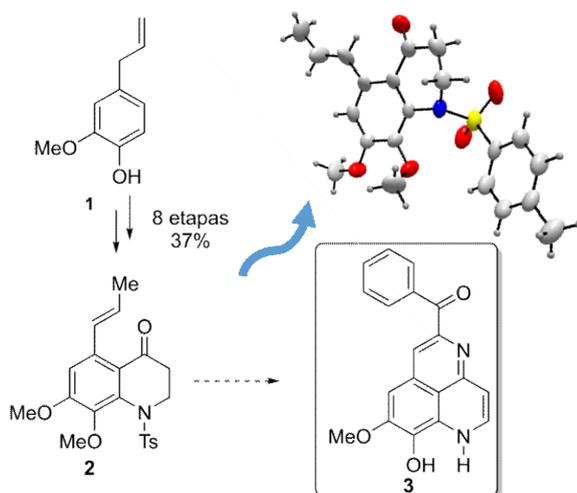


Figura 1. Esquema resumido de la obtención de la sulfonamida 2 y su estructura molecular.

Los resultados estructurales revelaron que 2 cristaliza en el sistema monoclinico, grupo espacial $P 2_1$ (4), con parámetros de celda: $a = 8.2177(3)$ Å, $b = 8.9900(4)$ Å, $c = 13.7403(6)$ Å, $\beta = 100.860(2)^\circ$ y $Z = 2$. El análisis de los datos estructurales muestra interacciones intermoleculares de tipo C-H...O que involucran: *i*) átomos de H del anillo aromático del tosilato y átomos de O de la sulfonamida de moléculas vecinas, formando cadenas extendidas a lo largo del eje a ; y *ii*) átomos de H $_{\beta}$ del vinilo y átomos de O de carbonilos quinolónicos. Estos enlaces intermoleculares contribuyen al autoensamblado supramolecular observado en 2 y a la estabilidad de su empaquetamiento cristalino.

[1] S. Bolívar Avila, Tesis de Doctorado, UNR (2024), y referencias allí citadas.

[2] D.A. Heredia, E.L. Larghi, T.S. Kaufman, Eur. J. Org. Chem. 7 (2016) 1397-1404.



ESTUDIO ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS DE *Trypanosoma cruzi*

I.M. Cabrera^{1,2} y J.A. Gomez Barroso^{1,2*}

¹Área de Biología Molecular, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis

²IMIBIO, CONICET

*jagomez@email.unsl.edu.ar

Palabras claves: ESTRUCTURA; PROTEÍNA; BIOINFORMÁTICA; CRISTALOGRAFÍA

La enfermedad de Chagas es causada por el protozoo flagelado *Trypanosoma cruzi* y es transmitida a humanos por el insecto vector *Triatoma infestans* [1]. Tiene una prevalencia general estimada en 6-8 millones de casos y 65-100 millones de personas en riesgo de contraer la infección. Actualmente, no hay vacunas disponibles y las drogas utilizadas en el tratamiento muestran efectos secundarios indeseables. La creciente comprensión de las vías bioquímicas de *T. cruzi* ha permitido la identificación de nuevos posibles blancos para el desarrollo de futuras drogas, que incluyen enzimas importantes para la supervivencia del parásito.

Las adenilato quinasas (ADKs) son enzimas que juegan un papel clave en el metabolismo energético del parásito. El rol energético de adenilato quinasa ha cobrado importancia luego del descubrimiento de que esta enzima facilita la transferencia y la utilización de grupos fosforilo γ y β en la molécula de ATP a través de una serie de reacciones secuenciales que son vitales para el parásito [2]. Es importante destacar, que la Adenilato Kinasa 1 de *T. cruzi* (TcAdK1) posee diferencias con su homóloga humana fundamentalmente en su extensión N-terminal característica.

El objetivo principal de este trabajo es el estudio estructural de la proteína TcAdK1 por técnicas bioinformáticas y cristalografía de rayos-X. Se han construido modelos por homología para la proteína en estudio utilizando el programa Modeller [3], complementariamente se obtuvieron modelos tridimensionales con AlphaFold2. También se estudió la formación de oligómeros realizando ensayos de docking utilizando las herramientas ClusPro, HDOCK, AlphaFold2 [4] y PISA.

Se puso a punto la sobreexpresión y purificación de la proteína TcAdK1 para la obtención de la proteína en alto grado de pureza que permiten la realización de ensayos cristalográficos. A partir de los “screening” mediante microbatch, se obtuvieron cristales de TcAdK1 en diferentes condiciones. Luego se realizó la optimización de dichas condiciones mediante Hanging drop obteniendo cristales de la proteína de mejor calidad (Fig. 1). Esto nos permitirá avanzar a la difracción de rayos X.



Fig. 1. Cristales obtenidos mediante Hanging drop

[1] WHO (2017). Chagas disease (American trypanosomiasis).

[2] L.A. Bouvier, M.R. Miranda, G.E. Canepa, M.J. Alves, C.A. Pereira CA, Biochim Biophys Acta. 1760 (2006) 913-21. <https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2006.02.013>

[3] B. Webb, A. Sali, Methods Mol Biol. 1654 (2017) 39-54. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-7231-9_4

[4] R. Evans et al., biorxiv 10 (2021) 2021.10.04.463034. <https://doi.org/10.1101/2021.10.04.463034>



NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS DE ÓXIDO DE HIERRO RECUBIERTAS CON ÁCIDO TÁNICO Y DECORADAS CON NANOPARTÍCULAS DE PLATA PARA APLICACIONES BIOMÉDICAS

V.C. Cajiao Checchin^{1*}, J. Fuentes-García², D. Arrieta¹, G. Goya², N. Fagali¹

¹INIFTA Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (UNLP, CCT-CONICET) Buenos Aires

²INMA, CSIC-UNIZAR, MAGNA, C/ Mariano Esquillor, s/n Campus Río Ebro - 50018 Zaragoza, España

*valen.svp@gmail.com ; valentinacajiao@inifta.unlp.edu.ar

Palabras claves: NANOPARTÍCULAS; RECUBRIMIENTOS; ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA

Las infecciones bacterianas relacionadas con implantes son una amenaza creciente para los sistemas de salud, destacando la necesidad de estrategias innovadoras que reduzcan el uso de antibióticos y mitiguen sus efectos adversos [1]. En respuesta, se diseñó un método para dotar de propiedades antimicrobianas a nanopartículas de óxido de hierro (IONPs) mediante su decoración con nanopartículas de plata (NPAg), preservando al mismo tiempo sus propiedades magnéticas. Este proceso involucró el recubrimiento de las IONPs con ácido tánico (AT) y la posterior síntesis *in situ* de NPAg.

Se llevó a cabo la síntesis de IONPs mediante un método sonoquímico utilizando sulfato de hierro a pH alcalino. Para realizar el *capping*, las IONPs se incubaron bajo agitación con AT a pH 6 durante 24 horas, dando lugar a las IONPs@AT. Las nanopartículas, con y sin recubrimiento de AT, fueron caracterizadas utilizando técnicas como FT-IR, TGA y potencial Z. La caracterización HRTEM de las IONPs confirma la presencia de magnetita y permite estudiar su estructura cristalina mediante análisis de transformada rápida de Fourier (FFT). Se obtuvieron valores de distancia interplanar de 2.56 Å, 1.50 Å, 2.03 Å y 1.61 Å, correspondientes a los planos (311), (440), (400) y (511), respectivamente, adjudicables a la estructura cúbica de la magnetita Fe₃O₄ (JCPDF 002-1035). Las medidas de ATR-FTIR de las IONPs@AT mostraron picos característicos que confirmaron la presencia de AT como recubrimiento, observando las bandas atribuibles al carbonilo del éster entre 1730 y 1705 cm⁻¹ [2]. El análisis TGA de las IONPs@AT reveló una pérdida de peso del 9% a 260°C, consistente con la temperatura de degradación principal del AT [3]. Por último, las mediciones de potencial Z indicaron un valor negativo de -21.0 ± 0.8 mV para las IONPs@AT, en contraste con el valor positivo de +3.9 ± 1.9 mV observado para las IONPs sin recubrimiento.

Para la síntesis *in situ* de NPAg se utilizaron IONPs@AT previamente separadas del medio de síntesis por acción de un imán, AgNO₃ y BH₄⁻ y AT como agentes reductores bajo agitación durante 3 h a 60°C. La caracterización morfológica y composicional de las IONPs y de las IONPs@AT-NPAg se realizó mediante HRTEM-EDS. Las IONPs mostraron un tamaño promedio de 62 nm. Las NPAg sintetizadas *in situ* presentaron dos poblaciones, identificadas por TEM con un tamaño promedio: NPAg1 de 6 nm y NPAg2 de 84 nm. La población de NPAg1 más pequeñas se observaron decorando tanto las IONPs@AT como las NPAg2 de mayor tamaño.

En resumen, fue posible sintetizar IONPs recubiertas con AT decoradas con NPAg obtenidas por síntesis *in situ*. Se observó que las IONPs@AT estaban decoradas principalmente con la población más pequeña de NPAg1. Se propone a futuro optimizar el método de síntesis y separación magnética para lograr un decorado uniforme con NPAg pequeñas.

[1] V.C. Cajiao Checchin, A. Gonzalez, Prog. Org. Coat. 172 (2022) 107068.

[2] M.A. Pantoja-Castro, H. González-Rodríguez. Rev. Latinoam. Quím 39 (2011) 107-112.

[3] Z. Xia, A. Singh, Thermochemica Acta 605 (2015) 77-85.

Los autores agradecen al proyecto MSCA-RISE NESTOR (101007629), CONICET (PIP 2021 11220200100315CO); ANPCyT (PICT 2019-00631, PICT-2020-02169, PICT Start Up 2020- 0034) y UNLP (Project 11/X900) por el financiamiento otorgado para realizar este trabajo y se agradece a Y-TEC por las medidas de HRTEM-EDS.



NUEVAS FUNCIONALIDADES DE CEMENTOS ÓSEOS MEDIANTE LA ADICIÓN DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS

P.A. Calderón^{1*}, P.M. Botta¹, M.V. Álvarez², P.G. Bercoff³, E.J. Lima⁴, R. Zysler, M.A. Fanovich¹

¹Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Universidad Nacional de Mar del Plata, CONICET, Av. Juan B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata

²Grupo de Investigación en Ingeniería en Alimentos. Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Ambiente (INCITAA), Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Mar del Plata. Mar del Plata

³Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG), CONICET-UNC, Medina Allende s/n, Córdoba

⁴Laboratorio de Resonancias Magnéticas, CAB-CNEA, S.C. de Bariloche

*pcalderon@fi.mdp.edu.ar

Palabras claves: BIOMATERIALES; CEMENTOS ÓSEOS MAGNÉTICOS; HIDROXIAPATITA

En este trabajo se investigaron nuevas formulaciones de cementos de fosfatos de calcio (CPCs) con propiedades magnéticas. Los mismos se conforman a partir de una mezcla sólida de fosfatos de calcio y una solución acuosa, como fase líquida [1], que al fraguar endurecen y forman hidroxiapatita no estequiométrica (nsHA, ns-Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂). A la fase sólida de los CPCs se incorporaron nanopartículas de óxidos de hierro (IONPs) desnudas y funcionalizadas con 3-glicidiloxipropil-trimetoxisilano y ácido úsnico, como agente activo. Se investigó el efecto de diferentes contenidos de IONPs (0-20%) sobre los tiempos de fraguado (inicial y final) de los CPCs. Además, se evaluó la magnetización, la actividad antibacteriana y la respuesta a la hipertermia magnética de estos cementos compuestos.

Los resultados revelaron una notoria influencia del contenido de IONPs sobre los tiempos de fraguado y sobre la morfología de los cristales de ns-HA formados (Fig. 1). La magnetización de saturación de los CPCs resultó conforme con el contenido de IONPs presente. Los valores de hipertermia magnética mostraron un incremento de temperatura significativo proporcional al contenido de IONPs. Los CPCs con IONPs modificadas con ácido úsnico presentaron actividad antibacteriana contra *L. Inocua*. Los resultados obtenidos permitieron inferir que las formulaciones compuestas de CPCs pueden ser utilizados como rellenos óseos con propiedades terapéuticas prometedoras.

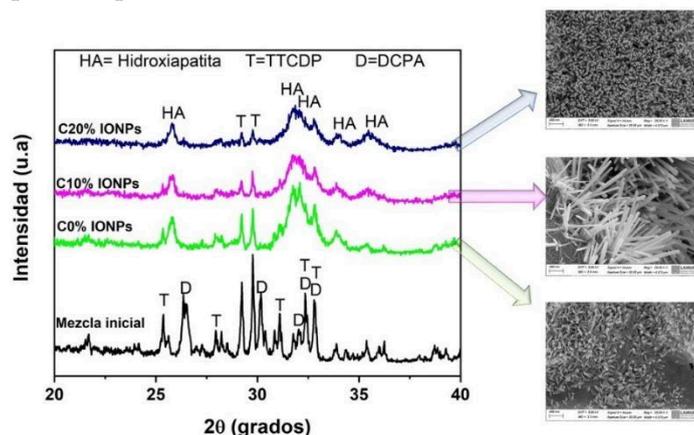


Fig. 1. Patrones DRX e imágenes SEM de los CPCs magnéticos con diferentes contenidos de IONPs.

[1] S.V. Dorozhkin, *Biomater. Sci.* 9 (2021) 7748-7798.



NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS DE ÓXIDO DE HIERRO (IONPs) FUNCIONALIZADAS CON NAPROXENO MEDIANTE CO₂ SUPERCRÍTICO

P.A. Calderón^{1*}, J. Czwalińska¹, M.A. Fanovich¹, P.M. Botta¹

¹Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Universidad Nacional de Mar del Plata, CONICET, Av. Colón 10850, Mar del Plata

*pcalderon@fi.mdp.edu.ar

Palabras claves: NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS DE ÓXIDO DE HIERRO; CO₂ SUPERCRÍTICO

En este trabajo se estudió la modificación superficial de nanopartículas magnéticas (IONPs) obtenidas mediante el método de coprecipitación a partir de sales de hierro [1]. La idea de modificar y funcionalizar con un fármaco la superficie de las IONPs utilizando dióxido de carbono supercrítico como solvente, es novedosa. Se estudió la modificación superficial de las IONPs utilizando 3-Glicidiloxipropil trimetoxisilano (glymo) y naproxeno (fármaco antiinflamatorio). Se estudió la influencia de la presión (150 y 300 bar) del proceso de funcionalización en medio scCO₂ sobre el grado de retención del fármaco en la red de siloxano formada sobre las IONPs. Las IONPs funcionalizadas (P150 y P300) fueron caracterizadas por difracción de rayos X (DRX), magnetometría de muestra vibrante (VSM), dispersión dinámica de luz (DLS), microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR) y análisis termogravimétrico (TGA).

Los resultados revelaron la obtención de nanopartículas de óxido de hierro con estructura de espinela (magnetita, maghemita) (Fig. 1) con valores considerables de magnetización (35 emu/g). Los análisis por FTIR y TGA corroboraron la efectividad del scCO₂ en la modificación superficial de las IONPs. Se evidenció que el proceso de funcionalización no alteró significativamente las propiedades magnéticas de las nanopartículas.

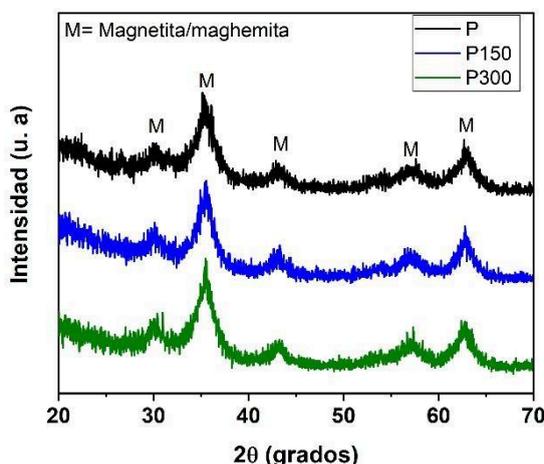


Fig. 1. Patrones DRX de IONPs desnudas (P) y funcionalizadas con Glymo/Naproxeno a dos diferentes presiones (P150 y P300).

[1] C. Ravikumar, J. Cryst. Growth 624 (2023) 127419.



ESTUDIO DEL CONTENIDO DE FASE AMORFA EN GEOPOLÍMEROS

B. Carranza^{1,2,3}, F. Booth^{1,2}, N. Okulik^{1,2}, R. Anaya^{3,4}, A. Mocciaro^{3*}, N. Rendtorff^{3,4}

¹Universidad Nacional Del Chaco Austral -Presidencia Roque Sáenz Peña, Chaco

²INIPTA– Presidencia Roque Sáenz Peña, Chaco- Argentina

³Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica, (UNLP-CIC-CONICET La Plata), Buenos Aires, Argentina.

⁴Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Buenos Aires, Argentina

*anamocciaro@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras claves: GEOPOLÍMEROS; AMORFO; CENIZAS

Los geopolímeros son polímeros inorgánicos formados por unidades tetraédricas de aluminio y silicio condensados a temperatura ambiente que resultan de la disolución de materias primas selectas de elevada reactividad tales como sílice amorfa (desechos industriales y/o arcillas naturales) en presencia de soluciones alcalinas [1]. Estos tipos de materiales tienen un elevado potencial para ser usados en numerosos campos, aunque predomina el uso como sustituto del cemento Portland. En estos últimos años ha ganado relevancia su utilización como materiales aislantes de interés en la industria de la construcción.

En el presente trabajo se obtuvieron geopolímeros a partir de mezclas de cenizas de cáscara de arroz (30 % p/p) con metacaolín (arcilla Tinkar calcinada) y una solución activadora 10 M de NaOH. Los mismos fueron curados en estufa a temperatura y humedad relativa controlada (80 °C y 90 % respectivamente) y otros por microondas.

Los materiales obtenidos a partir de los métodos de curado fueron caracterizados por difracción de rayos X (DRX), infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), microscopía electrónica de barrido (MEB), densidad por picnometría. Las propiedades mecánicas fueron evaluadas por módulo de flexión (MOR), módulo elástico obtenido por la técnica de excitación por impulso y compresión.

Los resultados obtenidos por DRX mostraron que los materiales están constituidos principalmente por cuarzo y fase amorfa mientras que como fase minoritaria se encontró muscovite. El contenido de fase amorfa fue calculado utilizando el modelo de Le Bail en donde se utilizó la fase de dióxido de silicio para modelar el contenido amorfo. Se pudo observar que conforme aumenta la temperatura el contenido de fase amorfa aumenta a expensas de la disolución de fases presentes tales como moscovita.

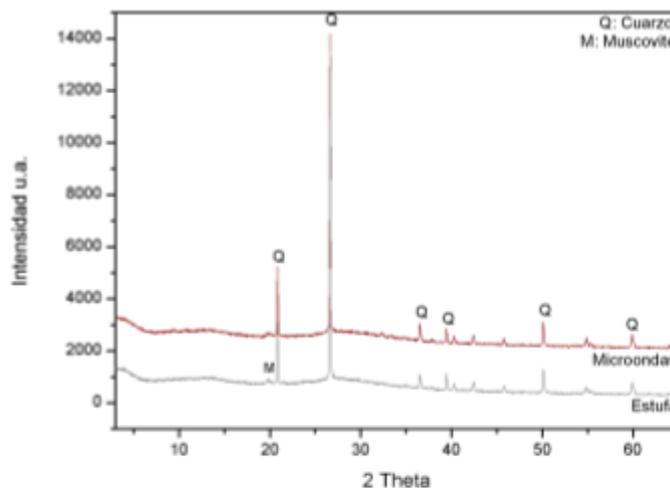


Figura 1. Difractogramas de geopolímeros curados en estufa y en microondas

[1] P. Nuaklong, P. Jongvivatsakul, T. Pothisiri, J. Clean. Prod. 252 (2020) 4-8.

[2] M.S. Conconi, N.M. Rendtorff, E.F. Aglietti, Cuantificación de la fase no cristalina de un cerámico refractario del sistema Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂, por tres métodos basados en la Difracción de Rayos X. SAM CONAMET 200 (2009).



Na₃Li(SO₄)₂·6H₂O, UNA NUEVA FASE EN EL SISTEMA Na₂SO₄-Li₂SO₄ A 20°C

N.L. Chiaramonte^{1*}, M.C. Blanco¹, M.G. García^{1,2}, F. Colombo^{1,2}

¹Centro de Investigaciones en Ciencias de la Tierra, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas-Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba

²Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba

*nati.chiaramonte@gmail.com

Palabras claves: SÍNTESIS; SULFATOS DE SODIO/LITIO; SALMUERAS LITIFERAS; REFINAMIENTOS RIETVELD; DIAGRAMA DE FASES

En la Puna Argentina, el litio (Li) se recupera por evaporación de salmueras de tipo clorurada sódica, ricas en Li que se bombean desde los sedimentos de los salares. Los minerales precipitados en los piletos de evaporación son principalmente sulfatos y cloruros de Na-K-Ca-Mg. Debido a las importantes pérdidas en la recuperación de Li durante el proceso, se estima que parte del elemento queda retenido junto con las sales precipitadas en las piletas de evaporación. Dado que la thenardita (Na₂SO₄) es una de las fases más abundantes que precipitan, se considera relevante investigar su capacidad de incorporar Li.

Para ello, se diseñó una secuencia de síntesis con proporciones variables de sulfatos de Li y Na a 20 °C, tomando como referencia un determinado campo del diagrama de fases Na₂SO₄-Li₂SO₄ propuesto por [1]. Las condiciones utilizadas exceden a las observadas en condiciones naturales, donde las sales precipitadas se aproximan mucho al extremo Na₂SO₄, por la elevada relación molar Na:Li (~46) de las salmueras en las últimas etapas de la evaporación [2]. Esto tiene como objetivo, definir mejor el campo de estabilidad de las fases involucradas, así como de fases composicionalmente intermedias, en condiciones de temperatura para las que no existen datos aún.

La síntesis consistió en mezclar soluciones acuosas de Na₂SO₄ y Li₂SO₄ en diversas proporciones (Na-Li de 90.5-9.5 hasta 33-67 % molar), con un total de 10 combinaciones, dejándolas evaporar a sequedad (aproximadamente de 40 a 50 días) a una temperatura cercana a los 20 °C. Se procedió a la molienda del material precipitado y a su análisis por DRX (difracción de rayos X) de polvos, permitiendo de esta forma la identificación de las fases presentes, mediante el software Highscore. Se continuó con el análisis estructural por refinamiento Rietveld de los patrones de DRX, a través del programa FULLPROF. A partir de este análisis, se determinaron los parámetros de red y la proporción en peso de cada fase identificada. Los productos precipitados incluyen, entre otros, Na₂SO₄, Li₂SO₄·H₂O, Li₂SO₄ y LiNaSO₄. A su vez, se observó la presencia de una fase no informada en dicho diagrama para temperaturas mayores a 150°C: Na₃Li(SO₄)₂·6H₂O. En una de las síntesis, donde la relación Na:Li de la solución era ~ 3:1, fue la única fase precipitada. El grupo espacial de este compuesto es *R3c* (#161) y sus parámetros de celda (refinados usando el modelo estructural a 293 K [3]) son *a* = 8,44661(3), *c* = 30,267(1) Å, *V* = 1870,1(1) Å³.

En el punto del diagrama de fases donde se obtuvo el compuesto puro, se midieron patrones de difracción separados por siete meses y se observa que la fase de interés puede ser metaestable ya que en el segundo caso aproximadamente 3 % del material se ha descompuesto a LiNaSO₄.

Los diagramas de fases del sistema Na₂SO₄-Li₂SO₄ han sido determinados en intervalos de temperaturas relativamente elevadas (≥ 150°C, [1] y [4]). Los resultados obtenidos en nuestro estudio muestran que estos diagramas no son extrapolables a temperaturas de ~20 °C, y por lo tanto inaplicables a la comprensión de los procesos que operan en las plantas de obtención de Li a partir de salmueras.

[1] C.W. Bale, A.D. Pelton, *Calphad*, 6 (1982) 255-278.

[2] Reporte interno de la empresa Sales de Jujuy.

[3] H. Schmidt, I. Paschke, W. Voigt, *Acta Cryst. E77* (2021) 924-929.

[4] J. Mata, X. Solans, M.T. Calvet, J. Molera, M. Font-Bardia, *J. Condens. Matter Phys.* 14 (2002) 5211.



**DESVELANDO LAS INTERACCIONES MOLECULARES EN UN COMPLEJO DE
CU(II)-DIPICOLINATO: UN ENFOQUE CRISTALOGRAFICO Y ESPECTROSCOPICO**

M.M. Citta^{1*}, A.L. Pérez¹, A. Kemmerer¹, R. Baggio², S. Suarez², A.F. Crespi^{3,4}, J.M. Lázaro-Martínez^{3,4},
C.A. Ramos⁵, S.D. Dalosto⁶, C.D. Brondino¹

¹Depto. de Física, Fac. de Bioquímica y Ciencias Biológicas, UNL - CONICET, Santa Fe

²Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Centro Atómico Constituyentes, CNEA, Buenos Aires

³Depto. de Ciencias Químicas, Fac. de Farmacia y Bioquímica, UBA, Buenos Aires

⁴Instituto de Química y Metabolismo del Fármaco (IQUIMEFA-UBA-CONICET), Buenos Aires

⁵Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA-CONICET, S.C. de Bariloche, Río Negro

⁶Instituto de Física del Litoral, UNL-CONICET, Santa Fe

*malala.citta@gmail.com

Palabras claves: EPR; MAGNETISMO; COBRE; DIPICOLINATO

El estudio y caracterización de las propiedades electrónicas y los acoplamientos magnéticos entre centros metálicos en sistemas modelo que contienen metales de transición paramagnéticos, tiene relevancia en múltiples áreas como química bioinorgánica, magnetismo molecular y espintrónica.

En este trabajo presentamos el estudio de las propiedades magneto-estructurales de catena-[(μ -2-piridina-2,6-dicarboxilato)-diaqua-cobre(II)] (en adelante CuDo). Este compuesto se sintetizó y cristalizó en condiciones particulares. Para la determinación de la estructura cristalina se realizó difracción de rayos X en muestras policristalinas y monocristalinas, de esta manera se logró identificar que la estructura ya se encontraba reportada en la Base de Datos Cristalográfica de Cambridge (CCDC). CuDo cristaliza en el sistema ortorrómbico, grupo espacial *Pnna*, con $Z=4$. La estructura presenta un átomo central de Cu(II) unido a dos moléculas de ácido dipicolínico, una completamente desprotonada y la otra completamente protonada.

En la celda unitaria pueden observarse cuatro sitios de Cu(II) químicamente idénticos, identificados como Cu1, Cu2, Cu3 y Cu4, los cuales mediante simetría se comportan como dos sitios magnéticamente no equivalentes. De estos, los sitios Cu1 y Cu4 son magnéticamente equivalentes, al igual que Cu2 y Cu3, pero son magnéticamente inequivalentes entre los pares Cu1-Cu4 con Cu2-Cu3. El análisis de la estructura cristalina nos permitió identificar un total de seis caminos químicos diferentes entre iones Cu(II): interacciones $\pi - \pi$ *stacking* entre sitios magnéticamente equivalentes; interacciones CO - π entre sitios magnéticamente inequivalentes y puentes de hidrógeno mediados por una molécula de agua de la red cristalina entre ligandos ecuatoriales y apicales de los sitios magnéticamente inequivalentes.

Se realizaron mediciones de espectroscopía de EPR en monocristal orientado, muestras policristalinas y en solución. Los espectros de EPR en muestras de polvo, medidos en banda X y Q, no evidencian estructura hiperfina resuelta con el núcleo de cobre ($I = 3/2$). El espectro de EPR en muestras de polvo medido en banda Q muestra simetría rómbica con tres valores g identificados como $g_1=2.0407$, $g_2=2.1354$ y $g_3=2.2188$. Los espectros de EPR en monocristal orientado, en las frecuencias de trabajo (banda X y Q), mostraron una sola línea de resonancia con forma Lorentziana para todas las orientaciones, lo que indica que los iones Cu(II) magnéticamente equivalentes y no equivalentes se encuentran colapsados por intercambio (J).

Se realizaron mediciones de susceptibilidad magnética en función de la temperatura, a campo magnético constante $H = 500$ Oe y en un rango de temperaturas entre 2 y 300 K, a la muestra de polvo de CuDo. Estos resultados permiten concluir que los iones de Cu(II) siguen un comportamiento del tipo Curie-Weiss y se encuentran acoplados antiferromagnéticamente.

La combinación de técnicas experimentales espectroscópicas como EPR y UV-Vis, y magnéticas como susceptibilidad, sumado a cálculos computacionales (en desarrollo), nos permiten determinar y caracterizar las propiedades magneto-estructurales del compuesto CuDo. Estos hallazgos proporcionan información valiosa sobre las interacciones entre centros metálicos en complejos de Cu(II), contribuyendo a la comprensión de sistemas similares en ámbitos biológicos y de ciencia de materiales.



EXSOLUTION OF NICKEL METAL NANOPARTICLES FROM CeO₂ DOPED WITH DIFFERENT CATIONS: ANALYSIS OF THE DOPING EFFECT ON STRUCTURE

D. Correa-Muriel^{1*}, P. Osorio-Vargas^{1,2}, I. Lick¹, M. Casella¹

¹Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA), (CCT La Plata-CONICET, UNLP, CIC PBA), 47 No. 257, 1900 La Plata, Buenos Aires

²Instituto de Química de Recursos Naturales IQRN, Universidad de Talca, Av. Lircay Casilla 747, Talca 3341717, Chile

*danielacorrea@quimica.unlp.edu.ar

Keywords: FLUORITE; EXSOLUTION; REDUCTION; METALLIC NANOPARTICLES

Oxide-supported metallic catalysts have been widely used in multiple catalytic processes, including those focused on energy production, such as catalytic reforming for H₂ production. These catalyst types are generally prepared newby chemical impregnation or co-precipitation methods. However, these catalysts often suffer early deactivation due to sintering metallic nanoparticles and carbon deposition formation. The "exsolution" method has been explored as an excellent synthesis procedure to increase the catalyst stability by the SMSI (metal-support-interaction) effect. This process dissolves reducible cations into an oxide under oxidizing conditions. Subsequently, these cations can be released as metallic nanoparticles after a partial reduction process, remaining "anchored" in the host structure [1]. Although perovskite-type oxides have been the most explored in this synthesis method, fluorite-type oxides such as CeO₂ have attracted much attention due to their recognized oxygen mobility, which can favor the exsolution process. In this context, this work aims to study the effect of Fe, Ti, and Al doping cations on the exsolution of metallic Ni nanoparticles as from doped CeO₂ (Ce_{1-x}(NiB)_xO_{2-δ} B=Fe, Ti and Al). Ce-doped materials were prepared using Pechini's method with a calcination temperature of 850°C and were characterized by XRD and HRTEM. The Le Bail refinement was carried out to determine the lattice parameter, and the crystallite size and microstrain were calculated from the Williamson Hall plot.

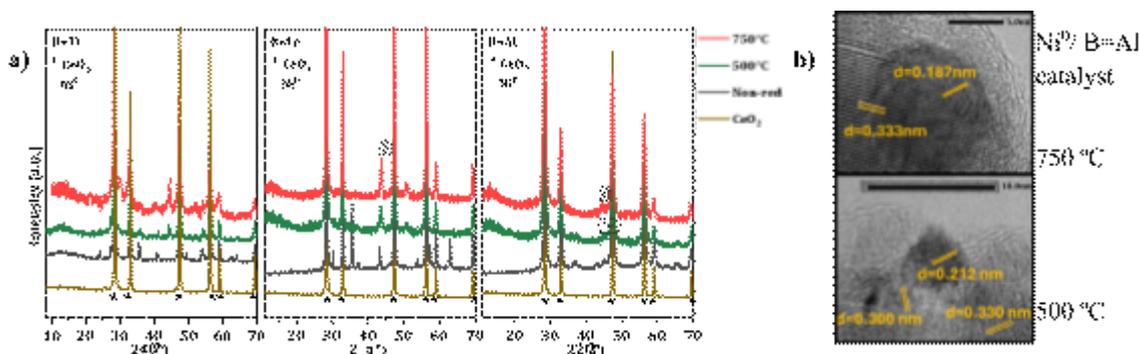


Figure 1. a) XRD patterns for Ce_{0.5}(Ni_{0.38}B_{0.62})_{0.5}O_{2-δ} non-reduced and reduced at 750 or 500°C, b) HRTEM.

The XRD patterns (Fig. 1a) confirmed the formation of fluorite structures (PDF: 081-0792), and small peaks due to segregated oxidic phases were detected. After the reduction process, with the cations Fe and Al as dopants, the fluorite structure with a Ni metallic phase was observed, evidencing the exsolution process. In contrast, other phases appear in Ce-Ti due to the formation of other mixed oxides during reduction treatment. The results of the Williamson-Hall results show a higher microstrain and minor lattice parameter on catalysts of Ce-Al reduced at both temperatures compared with undoped CeO₂, demonstrating the structural changes undergone by doping and during the process of exsolution. The HRTEM micrographs of Ce_{0.5}(Ni_{0.38}Al_{0.62})_{0.5}O_{2-δ} (Fig. 1b) showed the effective formation of the Ni metal nanoparticles anchored on the mixed oxide (d=0.212 and d=0.187 correspond respectively to the 1 1 1 and 2 0 0 planes of Ni⁰), which could strongly favor their stability.

[1] H. Jeong, Y.H. Kim, H. Jeon, C.H. Park, J.H. Myung, Chem. Mater. 35 (2023) 3745-3764.



PHASE EQUILIBRIA IN THE ERBIUM-NIOBIUM SYSTEM: EXPERIMENTAL INVESTIGATION AND CALPHAD THERMODYNAMIC DESCRIPTION

C. Corvalán Moya^{1*}, S. Kardellass², J.M. Joubert³

¹Comisión Nacional de Energía Atómica, Universidad Nac. de Tres de Febrero, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

²Université Mohammed V, Ecole Nationale Supérieure d'Arts, Département de Génie Énergétique & Environnement et Métiers-Maroc

³Centre National de la Recherche Scientifique, Université Paris-Est Créteil, Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est- France

*carolinacorvalan@gmail.com

Palabras claves: ERBIUM-NIOBIUM SYSTEM; PHASE DIAGRAM; CALPHAD

Improving energy efficiency in nuclear reactors requires main measures that might enhance the overall performance and power output of the reactor. The crucial step is to improve energy conversion and reduce energy losses together with reducing environmental effects by optimizing resource consumption while minimizing waste output. Due to its high neutron absorption capacity, Er is commonly used to control the early reactivity in a nuclear power reactor, a crucial period for replacing fuel. New designs of nuclear fuel elements that improve their burning efficiency propose incorporating Er in the pellet with UO_2 or in the metal tube of the cladding (Zr-Nb based alloys). Er also seems very interesting as a material stabilizer, as quantities to ensure the thermodynamic stability of $(\text{Pu,Zr})\text{O}_2$. In this context, to understand and predict the microstructural properties, it is mandatory to know the phase diagrams of the elements involved, particularly binary and ternary systems. From them, and with adequate modeling through CALPHAD (CALCulation of PHase Diagrams) method [1], phase diagrams of multicomponent systems of industrial interest can be predicted.

In the current work, the *Er-Nb* binary system was studied by combining experimental measurements and thermodynamic modeling. A series of four alloys compositions $\text{Er}_{50}\text{Nb}_{50}$, $\text{Er}_{86}\text{Nb}_{14}$, $\text{Er}_{91}\text{Nb}_9$, and $\text{Er}_{96}\text{Nb}_4$ were investigated by means of X-ray diffraction, Scanning Electron Microscopes and Electron Probe Micro-Analyzer. No stable binary compound was detected in the present experiments. Based on the CALPHAD method, the thermodynamic modeling of the *Er-Nb* binary system was carried out from our experimental data and literature information[2]. A set of thermodynamic model parameters was obtained.

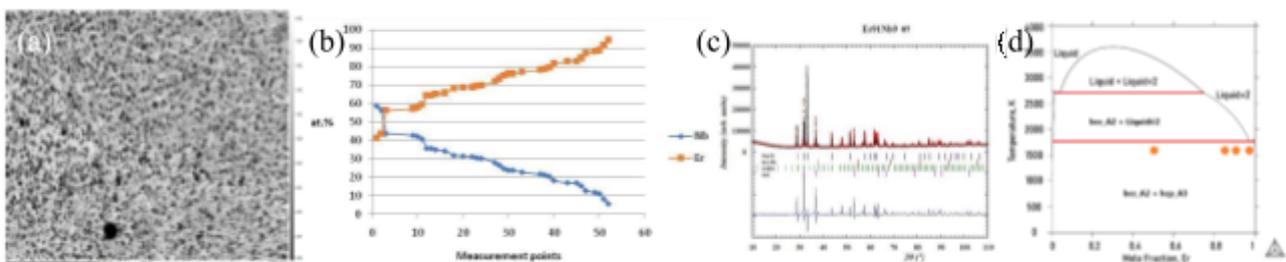


Figure 1. Sample $\text{Er}_{91}\text{Nb}_9$, heat treated at 1400°C - 24hr (on extreme conditions). (a) Scanning electron microscope (SEM) micrograph with backscattered electrons (BSE), (b) microprobe measurements (fine eutectic distribution), (c) diffractogram (red points) indexed by hcp-Er (blue positions I), bcc-Nb (red positions I), Er_2O_3 (green positions I), and ErN (pink positions I) structures. Black line: Rietveld refinement [3]; blue line: residual error. (d) Calculated Er-Nb phase diagram based on our experimental data and Love [2].

[1] L. Kaufman, H. Bernstein, Computer calculation of phase diagrams, Academic Press Inc (1970).

[2] B. Love, Properties of Yttrium and the rare earth metals oxygen and alloy systems Technical Report, Research Chemicals. Div. of Nuclear Corp. of America, Burbank, Calif. (1961).

[3] R.A Young, The Rietveld Method. IUCr, Oxford University Press (1993).



IDENTIFICACIÓN DE INTERMETÁLICOS EN SOLDADURAS POR DIFUSIÓN MEDIANTE LUZ DE SINCROTRÓN MICROFOCALIZADO

N. Di Luozzo^{1,2*}, M. Fontana^{1,2}, M. Boudard³, G. Garbarino⁴

¹Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Laboratorio de Sólidos Amorfos. Paseo Colón 850 (1063), Buenos Aires

²CONICET – Universidad de Buenos Aires. Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería “Hilario Fernández Long” (INTECIN), Buenos Aires

³Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LMGP (38000), Grenoble, Francia

⁴European Synchrotron Radiation Facility, 71 Avenue des Martyrs (38043), Grenoble, Francia

*ndiluozzo@fi.uba.ar

Palabras claves: SOLDADURAS POR DIFUSIÓN; INTERMETÁLICOS; RAYOS X; LUZ DE SINCROTRÓN

La soldadura por difusión mediante una fase líquida transitoria (transient liquid phase bonding, TLPB) se caracteriza por la utilización de material de aporte en forma de una fina lámina - destacándose las cintas metálicas amorfas con un espesor del orden de las decenas de μm . Este tipo de soldaduras han demostrado sus potencialidades en lo que respecta a las propiedades mecánicas de las piezas soldadas - en particular en tracción y en flexión en productos metálicos, entre ellos los aceros al carbono.

Las soldaduras TLPB se llevan a cabo colocando entre las piezas a soldar el material de aporte - con un punto de fusión (T_A) inferior al del metal base (T_B). El conjunto es calentado, a la temperatura de proceso T_p , intermedia entre T_A y T_B . Una rápida interdifusión de los elementos aleantes ocurre entre el material de aporte, ya líquido, y el metal base. Este proceso difusivo produce un cambio en la composición del líquido, lo que ocasiona su solidificación y por consiguiente la soldadura entre ambas piezas.

Cuando la solidificación del líquido no se completa durante la permanencia a T_p , el líquido remanente solidifica durante el enfriamiento formando una o varias fases - en general intermetálicos. La formación de intermetálicos en la junta es indeseada debido a la fragilidad que las caracteriza, degradando las propiedades mecánicas de la misma. Por lo tanto, la caracterización de los intermetálicos que se formen en la junta es de suma importancia.

En este trabajo se presenta un nuevo enfoque para la caracterización de dichas fases. La actual disponibilidad de luz de sincrotrón microfocalizado - con un ancho a mitad de altura del haz (full width half maximum, FWHM) inferior a $10 \mu\text{m}$, y el microposicionamiento del mismo permite realizar experiencias de difracción de rayos X (X-ray diffraction, XRD), en transmisión, directamente sobre la fase intermetálica que se desea determinar. De esta forma, la única condición que la muestra debe cumplir para poder realizar dicha medida es que su espesor sea lo suficientemente delgado para que la señal transmitida posea la intensidad necesaria.

En este estudio de soldaduras TLPB, se utilizó acero al carbono Grado E235 como metal base, y cintas metálicas amorfas Metglas® SA1 (Fe-5Si-3B, wt.%) como material de aporte. Las mediciones se realizaron en la línea ID27 del ESRF con un FWHM de $4.5 \mu\text{m}$ y una $\lambda = 0.3738 \text{ \AA}$. Las muestras de las soldaduras fueron adelgazadas hasta un espesor de $20 \mu\text{m}$ mediante pulido metalográfico. Del análisis por XRD, los intermetálicos presentes en la junta fueron identificadas como la fase metaestable Fe_{23}B_6 - Grupo Espacial Fm3m.



**CARACTERIZACIÓN MINERALÓGICA Y EVALUACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE
ARCILLAS DE LA LOCALIDAD DE VICTORIA, ENTRE RÍOS
(DELTA SUPERIOR DEL RÍO PARANÁ)**

V. Di Prado¹, M.S Conconi^{2*}, S. Ferrería³, M. Morosi², D. Benito², E. Maggiori⁴, F. Moreira⁵, L. Paoletti⁶, D. Campos³

¹CONICET, Instituto de Investigaciones Arqueológicas y Paleontológicas del Cuaternario Pampeano (INCUAPA), Olavarría, Buenos Aires, Argentina; Facultad de Ciencias Naturales y Museo, UNLP, La Plata, Buenos Aires

²CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC), CONICET-CIC-UNLP, M.B. Gonnet Buenos Aires

³Asociación Civil TALLER FLOTANTE, Victoria, Entre Ríos

⁴Taller En torno a vos, Rosario, Santa Fe

⁵Taller Cerámicas Fabio Moreira, Paraná, Entre Ríos

⁶ CONICET, Instituto de Procesos Biotecnológicos y Químicos (IPROBYQ), Rosario, Santa Fe

*msconconi@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras clave: DELTA SUPERIOR DEL RÍO PARANÁ; ALFARERÍA; ARQUEOMETRÍA; MATERIAS PRIMAS

El análisis por difracción de rayos X (DRX) es una técnica frecuentemente utilizada en las investigaciones arqueológicas para caracterizar la composición mineral de cerámicas, sedimentos y rocas colorantes y aptas para la talla [1]. En particular, en el sur del Nordeste argentino se ha aplicado, complementada con otras técnicas, para abordar distintos momentos del proceso de manufactura de la alfarería arqueológica. Por un lado, para conocer la composición inorgánica de los minerales que dan color y funcionan como carga en pinturas y engobes [2], y, por el otro lado, para identificar fases minerales que sufren transformaciones cuando se superan determinadas temperaturas durante la quema [3]. A pesar de la capacidad de identificar en detalle los distintos tipos de argilominerales que ofrece el análisis por DRX, este potencial aún no ha sido aprovechado para estudiar, articulando con técnicas elementales y ensayos experimentales, las materias primas arcillosas seleccionadas y procesadas por los/as alfareros/as prehispánicos para formar la pared cerámica.

En este escenario elaboramos un diseño de investigación, en conjunto con miembros de la Asociación civil Taller Flotante de Victoria, Entre Ríos, e investigadores/as del CETMIC, que incluye el muestreo y análisis de arcillas, arenas y pigmentos del área de estudio, y el desarrollo de un programa experimental que recree las piezas arqueológicas con diversos objetivos. En esta contribución presentamos los primeros resultados de la aplicación de Difracción de Rayos X (DRX), Análisis Térmico Diferencial (ATD) y Termogravimétrico (TG), Dilatometría, Test de plasticidad y granulometría láser sobre seis muestras de arcilla recuperadas en los arroyos El Ceibo, Barrancoso y El Ceibal, habitualmente utilizadas por los/las alfareros/as contemporáneos. Las muestras fueron georreferenciadas y fotografiadas, y se realizaron pruebas de trabajabilidad en el terreno, con buenos resultados. Este trabajo representa un primer paso en la caracterización de las materias primas utilizadas en la producción alfarera prehispánica y contemporánea, y en la articulación de saberes procedentes de la arqueología, la cerámica artesanal, la química, la geología y la arquitectura del paisaje.

[1] M. Dubus, Difracción de los Rayos X, Arqueometría. Estudios analíticos de materiales arqueológicos. Travaux de l'Institut Français d'Études Andines (2018) 189-209.

[2] V. Di Prado, M.S. Conconi, M.A. Alvarez Manso, M. Gauna, X Congreso de Arqueología de la Región Pampeana Argentina, Olavarría, Argentina (2024) 170-171.

[3] V. Di Prado, M. Bonomo, S. Conconi, C. Castro, C. Genazzini, C. Silva, Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi. Ciências Humanas 17 (2022), e20210075.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE COBRE Y ANÁLISIS DE LA INCORPORACIÓN EN ORGANISMOS ACUÁTICOS

L. Dufou¹, G. Pastrana¹, G. Svartz^{2*}, S. Nieves³, J.I. Garrido Bravo⁴, F. Miceli⁴, M.L. Ortiz Arriaga⁴, M.C. Gardey Merino^{1*}

¹Complejo Tecnológico Pilcaniyeu, Centro Atómico Bariloche, CNEA, Bariloche, Río Negro

²IIIA-UNSAM-CONICET, Instituto de Investigación e Ingeniería Ambiental, Escuela de Hábitat y Sostenibilidad (EHyS), Universidad Nacional de San Martín (UNSAM), Buenos Aires

³Departamento BNCT, Centro Atómico Constituyentes, CNEA, CABA

⁴Laboratorio de Química Analítica en Medios Activos. Edificio Plantas Químicas, Centro Atómico Ezeiza, CNEA, Buenos Aires

*mariagardey@cnea.gov.ar, svartzgabriela@hotmail.com

Palabras claves: NANOPARTÍCULAS DE CUO; ORGANISMOS ACUÁTICOS; EVALUACIÓN ECOTOXICOLÓGICA

Las nanopartículas de CuO (NPs-CuO) se han incorporado fuertemente en varias actividades tecnológicas, como por ejemplo en catalizadores para síntesis orgánicas, producción de fármacos, sensores para la agricultura, conservación de alimentos, entre otras [1,2]. La liberación al ambiente, puntualmente a los medios acuáticos, de contaminantes como NPs-CuO, han comenzado a generar preocupación en el ambiente científico respecto a su toxicidad a corto y largo plazo, y el riesgo potencial para grupos más vulnerables, como los anfibios y peces. Los datos sobre el rango de concentración de diferentes NPs que pueden ser detectadas en el ambiente, son limitados, y es escasa la información sobre su destino en los ecosistemas. Por otro lado, el nivel guía de calidad de agua superficial establecido para la protección de la vida acuática en Argentina de Cu para compuestos no nanométricos es 2 µg/L. Entonces resulta necesario aportar valores guías para estas NPs en pos de ampliar la normativa vigente. Uno de los objetivos de este trabajo consiste en la caracterización de las NPs-CuO obtenidas en nuestro laboratorio por métodos de precipitación, y el otro objetivo es su evaluación ecotoxicológica sobre larvas de un anfibio (*Rhinella arenarum*) y peces (*Cnesterdon decemmaculatus*) mediante bioensayos estandarizados agudos y crónicos.

Las NPs-CuO fueron caracterizadas mediante Difracción de Rayos X (DRX) con un posterior Análisis de Rietveld para conocer su estructura cristalina; por medio de la isoterma de adsorción-desorción de nitrógeno a 77K para conocer el área específica superficial, y por la microscopía electrónica de barrido (MEB) para estudiar la morfología y estimar el tamaño de partícula. Las nanopartículas obtenidas presentaron una estructura cristalina formada por un 80% de la fase del óxido de cobre CuO y 20 % de sulfato básico de cobre (Antlerita) Cu₃(SO₄) OH₄, cuyo tamaño de partícula promedio obtenido por MEB estuvo entre 8-50 nm y el área específica superficial BET fue de 7,42 ± 0,05 m²/g.

Se realizaron además bioensayos estandarizados a distintas concentraciones subletales de NPs-CuO en las especies mencionadas, se determinó la incorporación de NPs-CuO mediante espectrometría de masas (ICP-MS).

En relación al contenido de cobre, se registró un aumento significativo en la incorporación con respecto a la muestra control, en las larvas expuestas a 5 y 10 mg NPs-CuO/L y en los peces expuestos a 10 mg NPs-CuO/L, en forma dependiente de la concentración de exposición.

Estos resultados indican el potencial de incorporación de estas nanopartículas en especies autóctonas de los ecosistemas acuáticos, por lo tanto, la liberación de residuos de NPs-CuO no tratados en el ambiente, debe regularse para proteger su biota.

[1] G. Ren, D. Hu, E.W. Cheng, M.A. Vargas-Reus, P. Reip, RP Allaker, J. Antimicrob. Agents 33 (2009) 587-590.

[2] O. Rubilar, M. Rai, G. Tortella, M. Diez, A.B. Seabra, N. Duran, Biotechnol. Lett. 35 (2013) 1365-1375.



ESTUDIO DE LA COMPOSICIÓN DEL GRANO DE TRIGO SARRACENO

M.A. Falcón^{1*}, M.A. Loubes^{2,3}

¹CONICET - Universidad de Buenos Aires. Instituto de Geocronología y Geología Isotópica (INGEIS). CABA

²Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Departamento de Industrias. CABA

³CONICET - Universidad de Buenos Aires. Instituto de Tecnología de Alimentos y Procesos Químicos (ITAPROQ). CABA

*mangelesfalcon@yahoo.com.ar

Palabras claves: DRX; PSEUDOCEREAL SIN GLUTEN; CALIDAD ALIMENTARIA; FRACCIONES DE MOLIENDA

En el contexto argentino, donde persisten desafíos significativos como bajos ingresos, déficit alimentario y la necesidad imperiosa de alimentos de calidad, la cristalografía emerge como una herramienta crucial. En este sentido, el estudio se enfoca en el trigo sarraceno, pseudocereal sin gluten con alto valor nutricional, el cual fue estudiado por difracción de rayos X para determinar el grado de cristalinidad de diferentes componentes del grano: granos enteros (GE), fracción de molienda (FM) y cáscara (C).

Se emplearon GE de trigo sarraceno provenientes de la Facultad de Agronomía de la Universidad de Buenos Aires. Los GE fueron sometidos a descascarado mecánico con un molino abrasivo Suzuki MT-95, y por tamizado (malla 1190 μm) esta fracción se dividió en C (retenida) y FM (pasante). Luego, se redujo el tamaño de partícula de las muestras con un molino de cuchillas y tamizado (pasante malla 420 μm). Para los análisis se empleó un difractómetro Brüker D2 Phaser 2^{da} generación, utilizando radiación de Cu ($\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$) e intervalo angular entre 4 y 60° en 2θ . Los difractogramas fueron procesados aplicando corrección de línea de base y suavizado (con filtro Savitzky-Golay). El grado de cristalinidad se calculó como la relación entre el área total y el área cristalina.

Los resultados revelaron que tanto el GE como la FM del trigo sarraceno presentaron un grado de cristalinidad idéntico de $31,8 \pm 0,1\%$. Los difractogramas (Fig. 1) mostraron un patrón tipo A, con picos intensos en 2θ a 15° y 23°, además de un doblete no resuelto a 17° y 18°, indicativos del predominio de almidón en ambas muestras. En contraste, la cáscara exhibió un grado de cristalinidad ligeramente inferior de 27,5%, con una intensidad reducida de los picos de almidón y un ensanchamiento del pico a 23°, sugiriendo una composición estructural diferente que podría incluir la presencia de celulosa o sílice, cuyos picos de difracción podrían superponerse.

Este estudio resalta la importancia de la difracción de rayos X para analizar la estructura cristalina de diferentes componentes del trigo sarraceno. Los hallazgos no sólo ofrecen perspectivas sobre las características estructurales del grano, sino que también indican posibles mejoras en su procesamiento para maximizar su valor nutricional y funcional en aplicaciones alimentarias. Además, prometen contribuir significativamente a la mejora de la calidad alimentaria y subrayan el papel crucial de la investigación científica para la mejora continua.

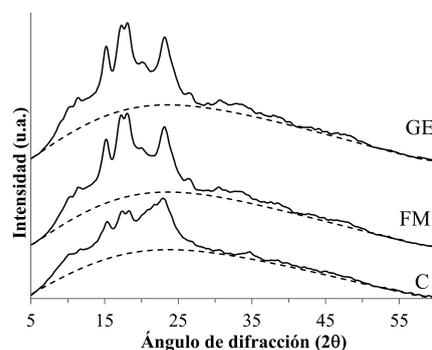


Figura 1. Difractogramas de los componentes del grano de trigo sarraceno.



IDENTIFICACIÓN DE AMIANTO POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X EN BALDOSAS PROVENIENTES DE UN EDIFICIO PÚBLICO

M.A. Falcón^{1,2*}, J.F. Guerrero^{1,2}, M. Do Campo^{1,2}

¹CONICET - Universidad de Buenos Aires. Instituto de Geocronología y Geología Isotópica (INGEIS). CABA

²Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Departamento de Industrias. CABA

*mangelesfalcon@yahoo.com.ar

Palabras claves: CRISOTILO; CÁNCER; CONSTRUCCIÓN

En el Instituto de Geocronología y Geología Isotópica (INGEIS), se realizaron análisis por difracción de rayos X (DRX) de 12 muestras de baldosas de tipo vinílica tipo SPC (elaborado a partir de PVC y roca de carbonato cálcico) provenientes de un edificio público. Esta solicitud fue hecha por los responsables de Higiene y Seguridad de la institución, quienes sospechaban que las baldosas podrían contener amianto.

Las baldosas, con un espesor de 2mm y una amplia variedad de colores, fueron molidas y analizadas usando un difractómetro Bruker D2 Phaser 2^a Gen. Estos análisis permitieron identificar crisotilo, un mineral del grupo de la serpentina conocido industrialmente como “amianto”, en 9 de las 12 muestras analizadas. Sin embargo, el crisotilo no es el mineral predominante; las baldosas están compuestas principalmente por carbonatos de calcio y/o magnesio (calcita y dolomita), junto con silicatos como cuarzo y feldespatos, junto por micas en pocos casos. Además, se identificó talco, un mineral frecuentemente asociado en la naturaleza con asbestos como el crisotilo.

Cómo análisis complementario se realizaron observaciones del material de las baldosas bajo lupa binocular para poder determinar su morfología y tamaño. Se puso especial énfasis en el largo, pues de acuerdo a la bibliografía, el largo de las fibras es crucial para determinar el riesgo para la salud. En este estudio se determinó que el crisotilo se presenta como fibras con un largo promedio de 192 μm . Si estas fibras se desprenden de las baldosas representan un riesgo, dado que la bibliografía indica que la inhalación de fibras de crisotilo de más de 20 μm de largo puede producir daños graves a la salud [1].

Estos resultados son coherentes con el hecho de que el amianto se usó en todo el mundo, en numerosos materiales para la construcción, incluidas baldosas, hasta la década de 1980. Posteriormente se fue abandonando su uso porque se comprobó que ingerir o inhalar fibras delgadas de amianto puede producir cáncer y enfermedades pulmonares graves como la mesotelioma [2]. Esto llevó a la prohibición total de su uso en algunos países, como es el caso de Alemania, Italia, Dinamarca, Holanda, Austria y Francia, mientras en otros como España se permite el crisotilo, aunque de una manera restringida y controlada [1]. En el caso de Argentina, se prohibió por resolución del Ministerio de Salud, la producción, importación, comercialización y uso de fibras de Asbesto variedad crisotilo y productos que las contengan a partir del 1° de enero de 2003 (Res. 823/2001)

Dado que el riesgo está en la inhalación del material, sería necesario hacer estudios del aire de cada uno de los recintos en los cuales se encuentran estas baldosas para determinar, si es que lo hubiere, la cantidad de fibras por centímetro cúbico de aire.

[1] Millipore, Ficha de datos de seguridad 1.2 MCE Asbestos Monitoring Wh GRD 100pk, RAWG0250C (2022).

[2] C.A. Barlow, M. Grespin, E.A. Best, Inhal. toxicol. 29 (2017) 541-554.



DISEÑO EXPERIMENTAL Y CARACTERIZACIÓN DE CERÁMICOS DE CIRCONIO DOPADOS CON ÓXIDOS DE MAGNESIO Y DE ALUMINIO

D. Fechner^{1*}, B. Quiroga², F. Castro², D. Silva¹, A. Melo¹, S. Leiva¹, S. Ilarri¹

¹División Nuevos Materiales y Dispositivos, Gerencia Combustibles Nucleares, Comisión Nacional de Energía Atómica

²Departamento Fisicoquímica de Materiales, Centro Atómico Bariloche, CNEA, CONICET e Instituto Balseiro

*dianafechner@cnea.gov.ar

Palabras claves: CERÁMICOS; BADDELEYITA; COMBUSTIBLES NUCLEARES.

Los cerámicos obtenidos a partir de la combinación de ZrO_2 , MgO y Al_2O_3 resultan de gran interés para su uso en el sector nuclear debido a sus elevados puntos de fusión, buenas propiedades termomecánicas y una alta resistencia a la temperatura de fundición de uranio metálico.

En esta primera etapa, se obtuvieron pastillas utilizando un diseño experimental D-optimal, donde las variables fueron las proporciones de los componentes mayoritarios (ZrO_2 , MgO y Al_2O_3), la temperatura y el tiempo de sinterización. Las pastillas se obtuvieron por prensado uniaxial (9 mm de diámetro y 6 mm de alto) luego de lo cual se llevaron a tratamiento térmico a 1400, 1500 o 1600 °C durante 1, 2 o 3 horas, caracterizándolas por difracción de RX y microtomografía de RX. Las fases cristalinas presentes mayoritariamente son óxido de zirconio y magnesio cúbico ($Zr_{1-x}Mg_xO_2$), baddeleyita (ZrO_2) y en menor proporción espinela ($MgAl_2O_4$); algunas pastillas presentaron también óxido de magnesio (MgO). Mediante refinamiento Rietveld de los difractogramas se realizó la cuantificación de fases, obteniendo distintos porcentajes según la proporción de materias primas utilizadas y la temperatura y tiempo de sinterizado de las pastillas. A través de la reconstrucción 3D de las microtomografías de RX, se observaron poros de dimensiones del orden de 140 a 2030 μm de diámetro aparente, pudiendo calcularse valores de porosidades en el rango de 8 a 10%.

Con este trabajo se busca contribuir al desarrollo y uso de recursos minerales para la potencial fabricación de crisoles de uso nuclear, principalmente en el ciclo de combustibles nucleares.

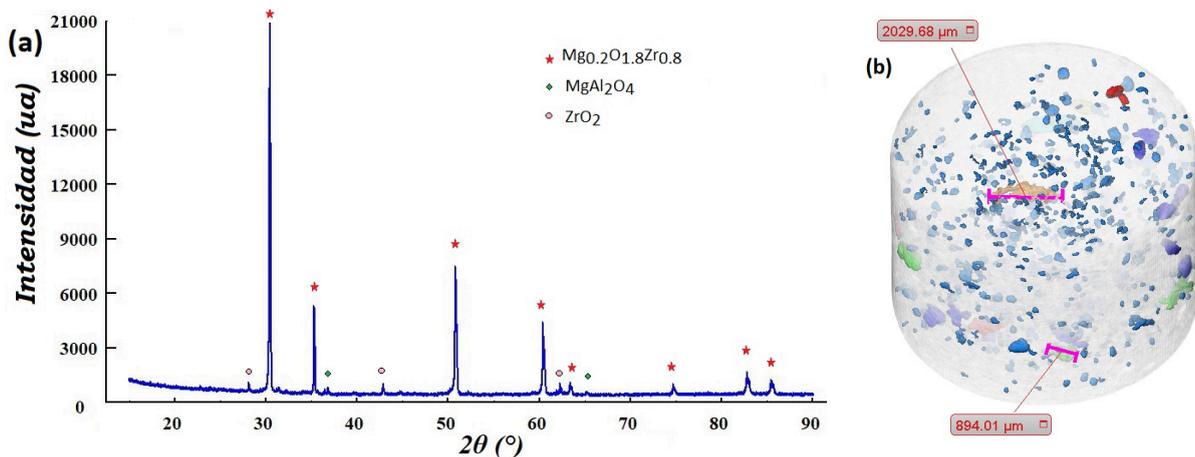


Figura 1: (a) Difractograma y (b) reconstrucción 3D de microtomografía RX de una de las pastillas sinterizadas durante 3 h a 1600°C.



IDENTIFICACIÓN DE ATROPISOMERÍA EN NUEVAS α -CLOROACETAMIDAS POR DRX

G.G. Fraga^{1*}, O.E. Piro², G.A. Echeverría², L.D. Sasiambarrena¹, A. Ponzinibbio¹, D.L. Nossa³, M.F. Erben³

¹CEDECOR (CIC, UNLP). Depto. de Química. Fac. de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. 1900. La Plata

²IFLP (CONICET, UNLP). Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. La Plata

³CEQUINOR (CONICET, UNLP). Departamento de Química. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. 1900. La Plata

*guidogustavofraga@quimica.unlp.edu.ar

Palabras claves: ATROPISOMERÍA; CLOROACETAMIDAS; DRX

La atropisomería es una forma de isomería generada por la rotación axial restringida alrededor de un enlace simple, ampliamente estudiada en moléculas orgánicas como arilalquenos y biarilos. En ambos casos, un enlace C–C se ve parcialmente impedido de rotar. En los últimos años se ha estudiado este fenómeno alrededor de enlaces C–N encontrando que moléculas sintéticas y productos naturales la presentan, siendo una característica estructural esencial en la bioactividad de las mismas [1].

En nuestro laboratorio hemos logrado sintetizar una nueva familia de naftil- α -cloroacetamidas [2] que en algunos casos presentan atropisomería. Se han logrado cristalizar y estudiar por difracción de rayos X seis *N*-((1-nitro-2-naftil)metil)-2-cloroacetamidas con grupos arilos sustituidos. Para los derivados con grupos cloro (1) y metilo (2) en posición orto se ha detectado la presencia de enantiómeros en el cristal (Figura 1).

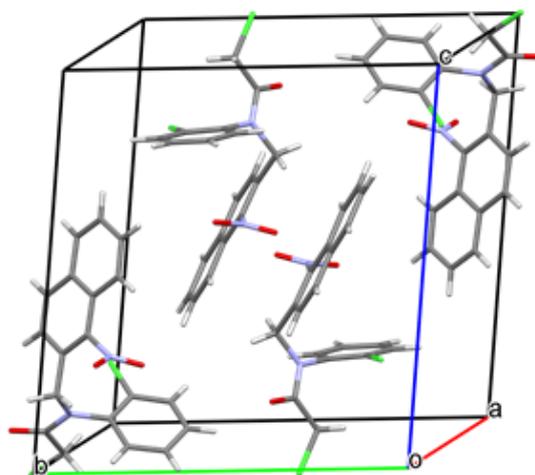


Figura 1. Estructuras moleculares atropisoméricas de 2, resueltas por DRX.

La cloroacetamida 1 cristaliza en el sistema triclínico con grupo espacial enantiomórfico $P1$ y la 2, en el sistema monoclinico con grupo espacial centrosimétrico $P2_1/n$. En ambos casos, el fenómeno de atropisomería se manifiesta claramente en solución y es visible en los espectros de resonancia magnética nuclear generando desdoblamiento de las señales de los protones de grupos metilenos adyacentes al eje quiral.

[1] G.J. Mei, W.L. Koay, C.Y. Guan, Y. Lu, Chem. 8 (2022) 1855–1893.

[2] G.G. Fraga, D.D. Colasurdo, C.C. Santiago, A. Ponzinibbio, L.D. Sasiambarrena, J. Mol. Struct. 1261 (2022) 132892.



CRECIMIENTO IN SITU DE PELÍCULAS NANOESTRUCTURADAS DE ÓXIDOS DE HIERRO EN SUSTRATOS DE LANA DE HIERRO

M.A. Franco^{1*}, F. Durán², M.A. Ulla¹, J.M. Zamaro¹

¹Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), UNL, FIQ, Santiago del Estero 2829, 3000, Santa Fe

²Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI), UNSL, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia. Almirante Brown 1455, 5700 San Luis

* mafrancomurcia@fiq.unl.edu.ar

Palabras claves: PELÍCULA CATALÍTICA; ÓXIDOS; HIERRO; CRECIMIENTO IN SITU

Los óxidos nano-estructurados pueden funcionar como catalizadores en aplicaciones catalíticas. En trabajos previos se demostró que películas de óxidos crecidas sobre diversos sustratos metálicos logran un buen desempeño como micro-reactores en la reacción de oxidación de CO [1-3]. En el presente estudio se analiza el desarrollo de películas nano-estructuradas de óxidos de hierro obtenidas por crecimiento in situ sobre lana de hierro comercial. Dichas películas, se obtuvieron mediante oxidación en mufla (2 °C/min).

En primer lugar, se analizó el efecto de la estructura/composición de las películas con la temperatura (300-600 °C) y luego con el tiempo (1-240 min a 600 °C). Por XRD (Fig.1a) se confirmó un crecimiento de Hematita (α -Fe₂O₃), Maghemita (γ -Fe₂O₃) y Magnetita (Fe₃O₄), mientras que en ninguna de las muestras se evidenció Wüstita (FeO). La señal del sustrato (Fe⁰) fue intensa, en línea con la formación de una delgada película de óxidos. A 300 °C no se observó óxido a nivel bulk, mientras que a 400 °C se formó mayormente Maghemita y Magnetita. A partir de 500 °C se intensificaron las señales de todas las fases de óxidos, resaltando la evolución de Hematita y un mayor desarrollo de Magnetita. En tanto, a 600 °C se incrementó significativamente la proporción de Hematita, a expensas de una disminución de Magnetita y Maghemita.

Las vistas por SEM en cortes transversales (Fig. 1b), mostraron dos zonas en los filamentos de la lana: un núcleo sólido de hierro metálico y un recubrimiento de óxido que resultó altamente poroso (Fig. 1c). En la muestra que resultó catalíticamente más activa y con buenas cualidades de estabilidad (600 °C), se analizó el efecto del tiempo de tratamiento (1-240 min). Por XRD

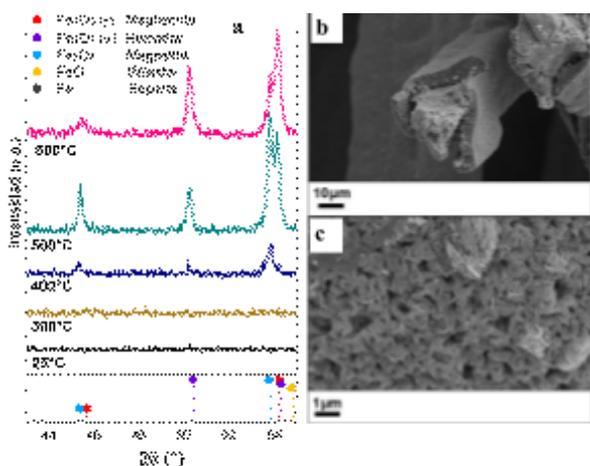


Figura 1. a) XRD películas óxidos de hierro 4h (25-600 °C)

b) Imagen SEM película de óxidos de hierro 600°C 4h

c) Imagen SEM: Zooms capa porosa de óxido 600°C 4h

se determinó que a nivel bulk la película se conforma de Hematita y Maghemita, sin presentarse cambios en sus proporciones a los diversos tiempos. Esto indica que la proporción de las fases se definen durante la rampa de calentamiento, mientras que el tiempo sólo modifica el espesor de la capa de óxidos. Esto último, se confirmó por SEM, observándose un aumento progresivo del espesor de la película desde 3 μ m (15 min) a 7 μ m (240 min). Este sistema de óxidos de hierro soportado en hebras delgadas mostró un destacado desempeño catalítico en la oxidación de CO y constituye una excelente plataforma para el desarrollo de micro-reactores de muy bajo costo y obtenidos a través de un método simple.

[1] A. Cabello, M. Ulla, J. Zamaro, Top. Catal. 62 (2019) 931.

[2] A. Cabello, M. Ulla, J. Zamaro, J. Mater. Sci. 57 (2022) 12797.

[3] A. Cabello, M.A. Franco, M. Ulla, J. Zamaro, Catalysts 13 (2023) 932.



ESTUDIO ARQUEOLÓGICO: CARACTERIZACIÓN MINERALÓGICA DE CUENTAS LÍTICAS DEL PERÍODO FORMATIVO EN LOS VALLES CALCHAQUÍES MERIDIONALES.

E. Freire Espeleta^{1,2,3*}, L.I. Cortés^{2,4}, C. Oubiña¹, E. Halac¹, M. Reinoso^{1,2,3}

¹Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Comisión Nacional de Energía Atómica. Av. General Paz 1499 (B1650KNA)

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET

³Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de San Martín, UNSAM

⁴Instituto de las Culturas, Universidad de Buenos Aires (UBA)

*elefreire@gmail.com

Palabras claves: DRX; RAMAN; FTIR; CUENTAS LÍTICAS

En este trabajo se presenta la caracterización de una muestra de 15 cuentas procedentes de 12 sitios arqueológicos ubicados en el Valle del Cajón, el Valle de Santa María y la Falda Occidental del Aconquija, en el extremo meridional de los Valles Calchaquíes. Estos sitios han sido fechados en el período Formativo (ca. 1500 a.C. - 1000 d.C.) mediante datación radiocarbónica o asociación contextual. Las cuentas fueron analizadas utilizando difracción de rayos X de polvo (DRX) y espectroscopia Raman (ER) para identificar los minerales responsables de su color. En casos de asignación difícil, se empleó espectroscopia infrarroja de reflectancia difusa (DRIFTS). Los principales minerales registrados fueron turquesa ($\text{CuAl}_6(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$), sodalita ($\text{Na}_8(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})\text{Br}_2$), muscovita ($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$), ópalo ($\text{SiO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$), aragonita (CaCO_3), crisocola ($\text{CuSiO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) y calcita (CaCO_3). Estos resultados revelan una notable diversidad de materiales utilizados, considerando el tamaño reducido de la muestra para el área y el período evaluados. Además, se ofrece una discusión sobre las materias primas y posibles fuentes de aprovisionamiento, relacionándolas con investigaciones previas realizadas en la región y áreas circundantes.



CARACTERIZACIÓN DE CENIZA VOLANTE Y ESCORIA DE ALTO HORNO NACIONALES PARA EMPLEO EN CEMENTOS ACTIVADOS ALCALINAMENTE

M.R. Gauna^{1,2*}, T.V. Lupori^{2,3}, M.A. Álvarez Manso¹, C. Rocco²

¹CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica; Cno. Centenario y 506; M. B. Gonnet

²Depto. Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería, UNLP; Av. 1 y 47; La Plata

³UIDIC, Unidad de Investigación y desarrollo en Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería, UNLP, 115 y 48; La Plata

*matias.gauna@ing.unlp.edu.ar

Palabras claves: CEMENTOS ALCALINOS; ESCORIA; CENIZA VOLANTE

Es bien sabido que desde la revolución industrial el hombre con el afán de mejorar su calidad de vida ha modificado considerablemente el ambiente que lo rodea sin importar las consecuencias que ello implique. A la vez, se conoce ampliamente que en la obtención de cemento portland se emite grandes cantidades de CO₂ a la atmósfera, el cual es uno de los principales gases de efecto invernadero y está relacionado directamente con la huella de carbono en nuestras vidas.

El presente desarrollo tiene dos importantes aristas, que están ampliamente ligadas entre sí. Por un lado, explorar la posibilidad de utilizar residuos industriales tales como cenizas volantes y escorias de alto horno, como base de partida para obtener nuevos materiales cementantes alternativos al cemento portland, dándole un valor agregado a estos desechos que hoy se descartan. Por otro lado, lograr reducir el consumo de cemento portland convencional, empleando estos materiales más amigables con el medio ambiente.

El trabajo se basa en la caracterización de los diferentes desechos para evaluar su potencial aplicación. Para ello, se emplearon residuos provenientes de industrias nacionales, a los cuales se los activa alcalinamente con diferentes activadores [1] y concentraciones de los mismos, con el fin de optimizar la mejor condición. Dicha caracterización consistió en la difracción de rayos X de polvo (DRX), cuantificación de fases cristalinas y amorfas por Rietveld, microscopía electrónica de barrido y análisis de elementos (SEM-EDS), análisis térmico diferencial y termogravimétrico (ATD-TG) y distribución de tamaño de partículas.

En función de los ensayos realizados, se desprende que la escoria de alto horno utilizada en dicho trabajo tiene características básicas y presenta un contenido importante de fase amorfa (Figura 1), lo cual se traduce en un alto potencial para el empleo de cementos activados. A su vez, la ceniza volante si bien presenta un alto porcentaje de pérdida por calcinación (alrededor del 15 %), en cuanto a la composición elemental y fases identificadas por DRX y contenido de amorfo, también es favorable dicho uso.

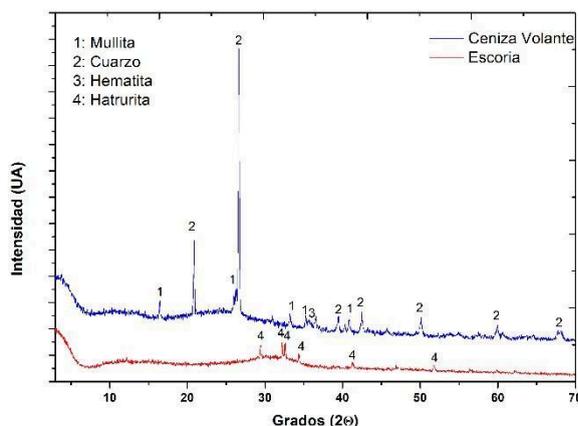


Figura 1. Difractograma de los residuos industriales. Azul: ceniza volante; Rojo: escoria de alto horno.

[1] P. Awoyera, A. Adesina, Case Stud. Constr. Mater. 11 (2019) e00268.



**POLIMORFISMO CONFORMACIONAL EN COCRISTAL DE
PREGABALINA Y ÁCIDO OCTANOICO**

P.E. Gaztañaga^{1*}, E. Freire Espeleta^{1,2}, D.R. Vega^{1,3}

¹Departamento de Física de la materia condensada, GAIDI, CAC, CNEA, San Martín, Buenos Aires

²CONICET

³Escuela de ciencia y tecnología, UNSAM, San Martín, Buenos Aires

*pablogaztanaga@cnea.gob.ar

Palabras claves: POLIMORFISMO; DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL; TRANSICIONES DE FASE; PREGABALINA; CALORIMETRÍA DIFERENCIAL DE BARRIDO

Se sintetizó un cocrystal de Pregabalina y ácido Octanoico realizando una mezcla en proporción 1:1 en una mezcla de agua y Etanol. Monocristales adecuados para difracción de rayos X de monocristal (SC-XRD) fueron obtenidos por método de evaporación lenta. La estructura cristalina a temperatura ambiente presenta características muy similares a la estructura de Pregabalina previamente reportada. [1] Pregabalina, un ingrediente farmacéutico activo (IFA) utilizado en el tratamiento del dolor neuropático, cristaliza en esta estructura como un zwitter-ión. En la estructura, cada molécula de Pregabalina se encuentra unida a otras tres moléculas de Pregabalina por medio de fuertes interacciones puente hidrógeno N⁺-H...O- formando una estructura 2D fuertemente cohesionada, paralela al plano cristalográfico (0,0,1). El ácido Octanoico se encuentra unido a esta estructura por medio de una interacción puente hidrógeno O-H...O- como se muestra en la figura (Figura 1). Al realizar mediciones a temperaturas menores, se observó que el cocrystal atraviesa varias transiciones de fase monocristal-monocristal, donde las mismas interacciones puente hidrógeno de la estructura a temperatura ambiente permanecen y los principales cambios en la estructura se atribuyen a cambios conformacionales en la molécula de ácido Octanoico. Se obtuvieron 4 estructuras cristalinas diferentes, todas fueron medidas por SC-XRD y las transiciones de fase también fueron caracterizadas por calorimetría diferencial de barrido (DSC).

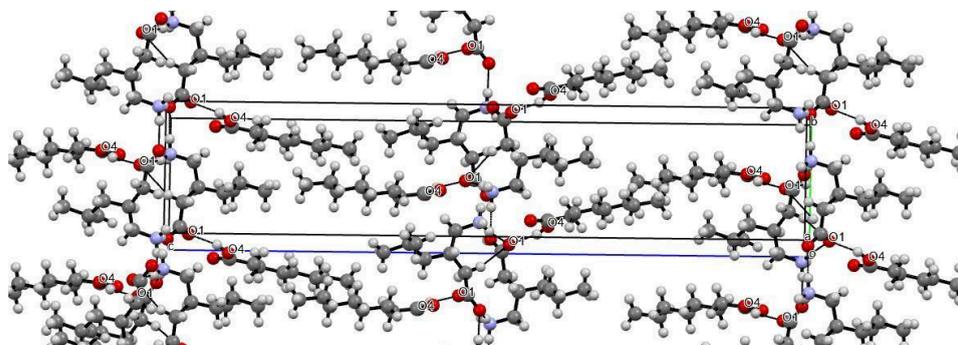


Figura 1. Estructura del cocrystal de Pregabalina y ácido Octanoico a temperatura ambiente

Además, sobre un monocristal se midieron los parámetros de celda a diferentes temperaturas permitiendo caracterizar la dilatación térmica del compuesto. Se encontró que las estructuras de mayor temperatura presentan expansión térmica negativa en la dirección del eje cristalográfico a.

[1] N. Venu, P. Vishweshwar, T. Ram, D. Surya, and B. Apurba, Acta Cryst. C 63 (2007) 306-308.



**CARACTERIZACIÓN DE TRES MORFOLOGÍAS DE VATERITA
OBTENIDAS POR SÍNTESIS DE PRECIPITACIÓN**

M. Gonzalez^{1,2,3*}, D.G. Lamas^{3,4}, A.L. Soldati^{1,2}

¹Departamento Ciclotrón y Radiofarmacia, Centro Integral de Medicina Nuclear y Radioterapia de Bariloche, INTECNUS- CNEA, San Carlos de Bariloche

²Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Nodo Bariloche, Av. Bustillo 9500, (8400) S.C. de Bariloche (RN)

³Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM, San Martín, Pcia de Buenos Aires

⁴Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, San Martín Pcia de Buenos Aires

*maria.gonzalez@intecnus.org.ar

Palabras claves: POLIMORFISMO; CARBONATO DE CALCIO; NANOMEDICINA

Dentro de las formas sólidas y cristalinas del carbonato de calcio, el polimorfo vaterita está siendo investigado en el área de la nanomedicina. Las propiedades de baja toxicidad, biodegradabilidad, alta capacidad de carga de moléculas orgánicas y bioactivas, y polimorfismo mediado por el pH la vuelven promisorio para su futura aplicación clínica, en particular para la carga, transporte y liberación de fármacos en células tumorales.

Siendo un material mucho más poroso y de mayor área superficial que los polimorfos aragonita y calcita, la vaterita se estabiliza en aglomerados policristalinos micrométricos, presentando cristalitas que rondan los 100nm. La morfología de los aglomerados, el tamaño de partícula alcanzado y la pureza polimórfica obtenida son muy dependientes de las condiciones de síntesis, como la temperatura, el pH, la velocidad de agitación de la solución, el orden de adición de los precursores y la utilización de aditivos.

En este trabajo se presenta un estudio sistemático de la obtención de vaterita por coprecipitación de CaCl_2 y Na_2CO_3 . La morfología se estudió por microscopías electrónicas de barrido (SEM) y de transmisión (TEM). El porcentaje de cada polimorfo y el tamaño de cristalitas se calculó por difracción de rayos X de polvos (XPD). La identificación de las fases cristalinas del producto, con cada una de las morfologías obtenidas, se realizó por espectroscopía RAMAN junto a un microscopio confocal con resolución espacial de un micrón.

Con pequeñas modificaciones en los parámetros de síntesis se obtuvo vaterita policristalina (Figura 1), aglomerada con morfologías esférica ($1.9 \pm 0.6 \mu\text{m}$), lenticular ($2.4 \pm 0.9 \mu\text{m}$) y framboidal ($1.9 \pm 0.9 \mu\text{m}$), con purezas del 80% al 95%, siendo el componente minoritario calcita monocristalina, con morfología romboidal y tamaños de grano micrométrico. En todos los casos los tamaños de cristalitas para la vaterita rondaron los 100 nm, mientras que para la calcita los $4.1 \pm 3.5 \mu\text{m}$.

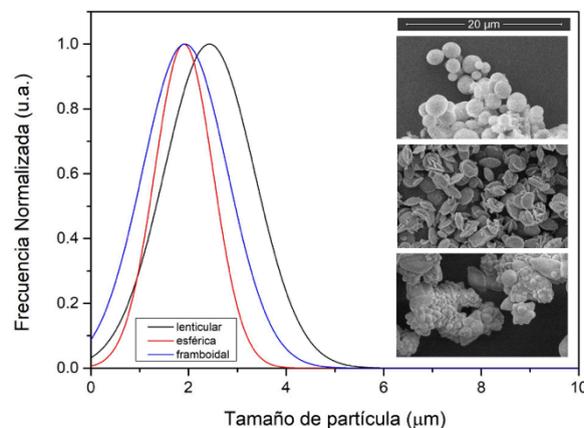


Figura 1. Tamaño de partículas y morfología obtenida de imágenes SEM de la vaterita policristalina.



ANÁLISIS CRISTALOGRÁFICO COMPARATIVO DE LOS MATERIALES ACTIVOS LiFePO_4 , NaFePO_4 y KFePO_4

L.A. Hernández^{1*}, E. Alarcón², J.J. Acosta², C.P. Ramos^{3,4}, L.G. Pampillo¹, F.D. Saccone^{2,5}

¹Laboratorio de Sólidos Amorfos, Facultad de Ingeniería, INTECIN, UBA-CONICET, Ciudad de Buenos Aires

²YPF Tecnología (Y-TEC), Berisso, Buenos Aires

³Laboratorio de Espectroscopia Mössbauer, Depto. De Física de la Materia Condensada, GlyA-CAC-CNEA, San Martín, Buenos Aires

⁴Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (INN), CNEA-CONICET, San Martín, Buenos Aires

⁵Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires

*lahernadezg@gmail.com

Palabras claves: OLIVINA; MARICITA; CÁTODOS; LITIO; ION

En el marco de una acelerada transición hacia el uso de fuentes de energía renovables, el creciente interés en dispositivos electrónicos portátiles y en vehículos eléctricos que sean más eficientes y seguros, requieren de un profundo entendimiento de los materiales que forman los sistemas de almacenamiento. Esto impulsa la investigación para desarrollar materiales activos para baterías con propiedades optimizadas, como la seguridad, capacidad gravimétrica, la eficiencia coulombica y la vida útil.

Este estudio presenta un análisis cristalográfico e hiperfino de los materiales catódicos de LiFePO_4 , NaFePO_4 y KFePO_4 mediante Difracción de Rayos X (DRX), espectroscopia Mössbauer (EM), Microscopia Electrónica de Transmisión (TEM) y Espectroscopia de Energía Dispersiva (EDS).

El análisis por el método de Rietveld da cuenta de diferencias en los parámetros de la estructura olivina (Pnma) para el LiFePO_4 , junto con la variación del tamaño de cristalito al modificar diferentes formas de síntesis. Respecto al NaFePO_4 , se utilizaron dos métodos de síntesis y se obtuvo en ambos casos la estructura maricita (Pmnb), con leves diferencias. Para el KFePO_4 , por medio de DRX se encuentra una fase con estructura del grupo espacial P21/n y otras fases secundarias. La espectroscopia Mössbauer (^{57}Fe) permitió identificar, a partir de los parámetros hiperfinos, los diferentes estados de oxidación del Fe, entre Fe^{3+} y Fe^{2+} para los materiales de LiFePO_4 y NaFePO_4 [1] con una sola fase, mientras que, en el caso del KFePO_4 aunque también presenta Fe^{3+} y Fe^{2+} se identificaron dos fases diferentes. Por otro lado, mediante TEM y EDS se obtuvieron algunas distancias entre planos cristalinos y el mapeo de dispersión de los elementos. Se hicieron recubrimiento de Shell de C en el LiFePO_4 (LiFePO_4/C). Se realizó caracterización electroquímicas con este.

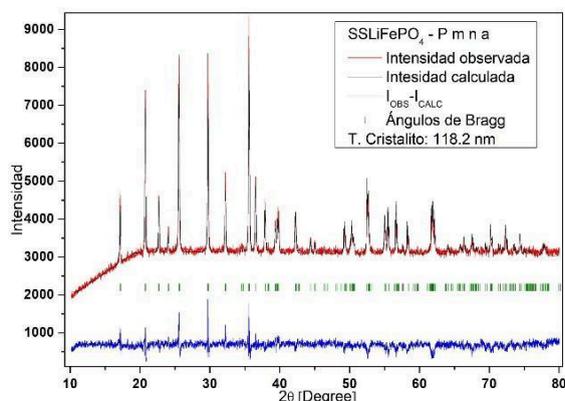


Figura 1. Difractograma de Rayos X del LiFePO_4 .

[1] C. Murugesan, S. Lochab, B. Senthilkumar, P. Barpanda, ChemCatChem 10 (2018) 1122.



EQUIPO DE DISPERSIÓN DE RAYOS X A BAJO ÁNGULO DEL LAHN - CNEA

F.C. Herrera^{1*}, F. Pschunder¹

¹Centro de Investigación Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones - CNEA. Centro Atómico Ezeiza, Cam. Real Presbítero González y Aragón 15, B1802 Ezeiza, Provincia de Buenos Aires

*facundocarlosherrera@cnea.gob.ar

Palabras claves: SAXS; WAXS; GISAXS; LAHN; CNEA

El Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones (LAHN) es un centro de investigación dependiente de la CNEA, distribuido en sus tres centros atómicos. El mismo tiene a cargo el desarrollo y la operación de los instrumentos de haces de neutrones que se ubicarán en el edificio del reactor multipropósito RA-10 que se encuentra en construcción en el Centro Atómico de Ezeiza (CAE). Dentro de los instrumentos que se pondrán operativos desde que entre en operación del reactor, se encuentran dos instrumentos de dispersión de neutrones a bajo ángulo (SANS) que estarán abiertos a la comunidad de usuarios.

Como complemento a las técnicas de SANS, el LAHN posee un equipo SAXSpoint 5.0 de Anton Paar instalado en el laboratorio TENDA (CAE) que permite realizar experimentos de SAXS, WAXS y GISAXS y está abierto a la comunidad científica local y regional bajo diferentes modalidades de colaboración. El mismo emplea una fuente de Cu Primux 100 con microfoco que genera un haz de rayos X con una longitud de onda de 1.5418 Å. Tanto el tramo de colimación como el entorno de muestra y el detector están conectados sin ventanas y a una presión de 0.5 mbar, permitiendo alcanzar un flujo máximo de 1.2×10^6 fotones/s.cm² sobre la muestra y evitando dispersiones espurias. Cuenta con diferentes celdas que permiten realizar experimentos con muestras sólidas, líquidas, polvos, pastas, geles y espumas, entre otros, controlando la temperatura entre -150 °C y 350 °C. También permite realizar experimentos de GISAXS con control de temperatura entre 20 y 500 °C. Cuenta con un detector bidimensional EIGER2 R de Pilatus con 1028 x 1064 pixeles de 75 x 75 μm², el cual puede moverse dentro del compartimento para modificar la distancia muestra-detector sin necesidad de perder el vacío.

En diferentes configuraciones permiten modificar la distancia muestra-detector (DMD) entre 70 y 1650 mm, alcanzando rangos en q de 0.01 nm⁻¹ (DMD = 1600 mm) más de 55 nm⁻¹ (a DMD de 70 mm). Este rango permite estudiar muestras con características en la nanoescala de hasta 100 nm.



Figura 1. Equipo SAXSpoint 5.0 de Anton Paar instalado en el laboratorio SAXS-TENDA, CAE.



TRANSFORMACIÓN CAOLINITA/DICKITA ASOCIADA A FILONES ÍGNEOS EN LA FORMACIÓN VACA MUERTA

K. Irvicelli^{1*}, M. Cipollone^{1,2}, I. Loyza¹, E. González Pelegrí¹, A. Fischer¹

¹YPF Tecnología (Y-TEC), Berisso (1923)

²IlyA, UNAJ

*karina.irvicelli@ypftecnologia.com

Palabras claves: CAOLINITA; DICKITA; VACA MUERTA; FILONES ÍGNEOS

En el presente trabajo se reportan dos observaciones particulares sobre la transformación caolinita-dickita. Se identificaron cambios morfológicos y estructurales en muestras de subsuelo de la Fm. Vaca Muerta mediante técnicas de MEB y DRX.

A partir de dichas técnicas se reconoció un aumento en el tamaño y cristalinidad de la caolinita y la incipiente transformación de la caolinita en dickita. Ambos procesos se proponen asociados a la transformación caolinita/dickita en roca shale vinculadas a zonas afectadas térmicamente por intrusivos. Debido a que no es común encontrar dickita en zonas someras [1], se establece su presencia como indicador de alteración por el efecto hidrotermal de intrusivos.

En cuanto a las observaciones de microscopía, como se ejemplifica en la imagen 1, se visualiza en la superficie de la muestra el aumento de espesor de los cristales, correspondiente a la dickita intercalada entre las láminas de caolinita. Dentro del poro presente en la misma imagen se puede apreciar una mejor definición de las caras cristalinas pseudo hexagonales de la dickita. Los cambios estructurales se evidenciaron a través de señales diagnósticas en los difractogramas, como por ejemplo el pico posicionado en $3,42\text{Å}$ [2].

Estas observaciones son cualitativas, y si bien se identifica un aumento de la dickita en cercanías de los filones, todavía no se ha encontrado una relación que permita establecer estos cambios en términos cuantitativos.

En este primer estudio, se reporta la particularidad de la presencia de dickita asociada a intrusivos ígneos en la Fm. Vaca Muerta. Como próximos desafíos de la línea de investigación nos proponemos la resolución de los mecanismos de formación y la comprensión de esta transformación en términos cuantitativos para así analizar su impacto tecnológico.

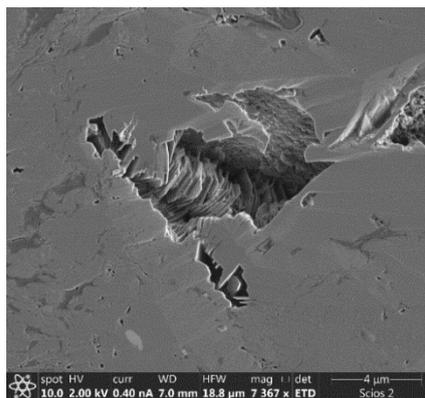


Imagen 1: Imagen MEB de transición caolinita-dickita

[1] D. Beaufort, A. Cassagnabere, S. Petit, B. Lanson, G. Berger, J.C. Lacharpagne, H. Johansen. Clay Miner. 33 (1998) 297-316.

[2] A. Garcia Vicente, A. Lorenzo Henández, J. Morales Sanchez - Migallón, E. Garcia Romero, M. Suárez Barrios. MACLA 25 (2021) 50-51.



**ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y MAGNÉTICO DE COMPLEJOS DINUCLEARES DE CO(II)
MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS X, EPR, UV-VIS Y DFT**

A. Kemmerer¹, A.L. Pérez¹, M.M. Citta^{1*}, A.J. Zapata¹, R. Sartoris¹, P.J. Gonzalez¹, R. Urteaga^{2,3}, R. Baggio⁴, S. Suárez⁴, C.A. Ramos⁵, S.D. Dalosto^{2,3}, A.C. Rizzi¹, C.D. Brondino¹

¹Departamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral - CONICET, Ciudad Universitaria, S3000ZAA Santa Fe

²Instituto de Física del Litoral, Universidad Nacional del Litoral - CONICET, Güemes 3450, 3000 Santa Fe

³Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, S3000ZAA Santa Fe

⁴Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires

⁵Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. Bustillo 9500, 8400 Bariloche, Río Negro

*malala.citta@gmail.com

Palabras claves: EPR; DRX; UV-VIS; MAGNETISMO; COBALTO

En la búsqueda de nuevos materiales con propiedades magnéticas, los complejos de coordinación de Co(II) en configuración de alto espín ($S = 3/2$) han cobrado relevancia debido a sus aplicaciones potenciales en imanes moleculares [1,2] y como sondas espectroscópicas en enzimas que contienen Zn(II) [3-5]. Estos complejos muestran propiedades magnéticas y espectroscópicas que son sensibles al entorno de coordinación, ofreciendo posibilidades diversas para la manipulación de sus características físicas.

Se sintetizó un complejo dinuclear de Co(II) utilizando ácido tiodiacético (Tda) y fenantrolina (Phen) como ligandos, identificado como 1, y se comparó con complejos isomorfos de Zn(II) y Cu(II), ya reportados [6,7]. Se prepararon series de complejos heterodinucleares con diferentes proporciones de Co(II):Zn(II) (2, 4:1; 3, 1:1; 4, 1:4; 5, 1:10). La caracterización incluyó técnicas de espectroscopía UV-vis, resonancia paramagnética electrónica (EPR), estudios de susceptibilidad magnética y magnetización. Los datos de difracción de rayos X se utilizaron para determinar la estructura cristalina e identificar los caminos químicos que comunican los iones en la red cristalina.

El análisis estructural mostró que 1 consiste en dímeros de iones Co(II) unidos por dos puentes μ -O, con cada ion en un entorno octaédrico distorsionado tipo N_2O_3S . Los espectros UV-vis y EPR confirmaron la configuración de alto espín para los iones Co(II) en 1. Los estudios de susceptibilidad magnética indicaron un acoplamiento ferromagnético intradimérico con un valor de $J = 1.39(4) \text{ cm}^{-1}$. Los experimentos de EPR en función de la proporción de Co(II) revelaron que las interacciones de intercambio interdimérica son insignificantes, contrastando con observaciones previas en análogos de Cu(II). Los resultados de magnetización y los cálculos computacionales utilizando DFT confirmaron una interacción ferromagnética intradimérica y sugieren un D significativo de $61(1) \text{ cm}^{-1}$, consistente con una alta distorsión rómbica. Las simulaciones por DFT, incluyendo acoplamiento espín-órbita y corrección DFT+U, muestran una buena concordancia con los datos experimentales, validando el modelo estructural sin necesidad de relajación estructural adicional.

Estos resultados sugieren que las interacciones magnéticas y las propiedades electrónicas de los complejos dinucleares de Co(II) pueden ser moduladas a través de la variación de la proporción de Co(II), lo cual tiene implicaciones significativas para el diseño de nuevos materiales con propiedades magnéticas.

[1] Z.X. Li, Y.F. Zeng, H. Ma, X.H. Bu, Chem. Comm. 46 (2010) 8540-8542.

[2] A. Caneschi et al., Chem. Eur. J. 8 (2002) 286-292.

[3] M. Kobayashi, S. Shimizu, Eur. J. Biochem. 261 (1999) 1-9.

[4] M.T. Werth et al., Inorg. Chem. 34 (1995) 218-228.

[5] B. Bennett, in Metals in Biology: Applications of High-Resolution EPR to Metalloenzymes, eds. G. Hanson and L. Berliner, Springer New York (2010) 345-370.

[6] N.I. Neuman et al., Inorg. Chem. Front. 2 (2015) 837-845.

[7] A.L. Pérez et al., Dalton Trans. 52 (2023) 14595-14605.



USO DE LA TÉCNICA DE SAXS COMO HERRAMIENTA PARA EL ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA INTERNA DE NANOPARTÍCULAS LIPÍDICAS

M.F. Ladetto^{1*}, G.A. Islan¹, G.R. Castro², D.G. Lamas³

¹Laboratorio de Nanobiomateriales, CINDEFI, UNLP-CONICET, La Plata, Buenos Aires

²NANOMED, UFABC. Av. dos Estados 5001, Santo André, São Paulo, Brasil

³Laboratorio de Cristalografía Aplicada, ITECA, UNSAM-CONICET, San Martín, Buenos Aires

*mflorencialadetto@gmail.com

Palabras claves: SAXS; NANOPARTÍCULAS LIPÍDICAS

Los diferentes tipos de nanopartículas lipídicas otorgan un notable potencial para biomedicina, por lo que frecuentemente son postuladas como alternativa para la vehiculización y liberación controlada de fármacos, especialmente aquellos que presentan problemas de solubilidad, absorción y/o toxicidad asociada a su uso. Particularmente, en los últimos años se ha observado un creciente desarrollo de formulaciones basadas en nanopartículas lipídicas sólidas (SLN), debido a su alta estabilidad, escalabilidad, sus procesos de síntesis sin solventes orgánicos, y con componentes biocompatibles y biodegradables, usualmente ya aprobados para uso clínico. Son sistemas coloidales, de nanopartículas constituidas por un lípido solidificado estabilizadas en suspensión acuosa mediante tensoactivos y/o polímeros hidrofílicos. La capacidad de carga de estas SLN requiere del acomodamiento de fármacos dentro de las imperfecciones de la matriz lipídica, para lo cual el lípido debe solidificar con un empaquetamiento cristalino poco ordenado con grandes distancias intermoleculares. Por ende, es crucial tener una comprensión más profunda de la estructura interna de estas nanopartículas. En este sentido, las técnicas de difracción y de dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) pueden brindar valiosa y reveladora información concerniente a la distribución y estructura interna de los lípidos, el tensoactivo y el agua asociada.

Si bien la mayor parte de la literatura asume que su estructura es de tipo “core-shell” en partículas sólidas lipídicas de forma definida (generalmente esférica), y el tensoactivo sólo adsorbido en la superficie de formando una barrera que imparte estabilidad al disminuir la agregación de las partículas, recientemente se ha propuesto un modelo alternativo [1], sobre la base de resultados de SAXS realizados en sincrotrón. Este consiste en plaquetas coplanares de un lípido (*i.e.*, cetil palmitato), cubiertas por moléculas de tensoactivo (polisorbato 80) poco espaciadas, cuyas cabezas polares retienen moléculas de agua unida, donde para incrementar la estabilidad del sistema las plaquetas se ordenan unas sobre otras formando las SLN.

En el presente trabajo se presenta un estudio de SLN preparadas mediante el método de emulsificación/ultrasonificación, compuestas por cetil palmitato como lípido sólido y Poloxamer 188 como surfactante, para encapsular dos antifúngicos: clotrimazol e itraconazol. El análisis estructural se realizó por difracción de rayos X de polvos y por SAXS, con un equipo de laboratorio de alta resolución. Los resultados obtenidos para el mismo lípido analizado en la referencia [1], pero con diferente tensoactivo, son compatibles con el nuevo modelo propuesto. Cabe destacar que un posible cambio de modelo de la estructura de las SLN tendría importantes implicaciones para la aplicación de las SLN en la liberación controlada de drogas.

[1] F. Spinozzi, P. Moretti, D.R. Perinelli et al., J Colloid Interface Sci. 662 (2024) 446-459.



SINTONIZANDO LAS PROPIEDADES DE MOFs CON ESTRATEGIAS DE QUÍMICA BLANDA: POLY-MOFs DE LA FAMILIA DEL ZIF-8

C. Legarto^{1*}, J. Romero¹, A. Iborra¹, I.N. Vega¹, J.M. Giussi¹, M. Rafti²

¹YPF Tecnología (Y-TEC), Berisso (1923)

²Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CONICET, La Plata (1900)

*Celeste.legarto@ypftecnologia.com

Palabras claves: METAL-ORGANIC FRAMEWORKS; POLY-MOFs; ZIF-8

Los MOFs (Metal-Organic Frameworks), son redes metal-orgánicas sintetizados a partir de iones metálicos y ligandos orgánicos, que forman estructuras ordenadas en tres dimensiones (3D), generando sólidos cristalinos con porosidad jerárquica. Su porosidad típicamente va en el rango de los microporos (menor a 2 nm), lo que les otorga áreas superficiales extremadamente elevadas. Los campos de aplicación más usuales son en procesos de adsorción, separación, intercambio iónico y catálisis.

La integración a nivel molecular entre MOFs y polímeros conforma un nuevo tipo de estructura compleja denominada poly-MOFs. Estos materiales híbridos tienen el potencial de aprovechar las ventajas que ambos ofrecen: la porosidad, la regularidad y la cristalinidad de los MOFs, con la estabilidad química, procesabilidad y control estructural de los polímeros [1].

En este trabajo, se presenta un enfoque novedoso y versátil para controlar la estructura y organización de películas delgadas de MOFs utilizando brushes poliméricos de diferente composición de Metacrilato de Zinc (ZDMA) y polietilenglicol metil éter metacrilato (PEGMA) como primer 3D, a fin de regular la nucleación heterogénea y el crecimiento de MOFs de la familia del ZIF-8 [2].

Mediante difracción de rayos X (Fig.1) se logró estudiar la influencia del material blando en relación con la aparición de los planos cristalinos característicos del ZIF-8 y sirvió además como parámetro para la evaluación de la formación del material híbrido. Tanto el material como el precursor blando fueron caracterizados usando técnicas de la ciencia de polímeros como por microscopía electrónica (SEM), Raman y técnicas de rayos X (XPS).

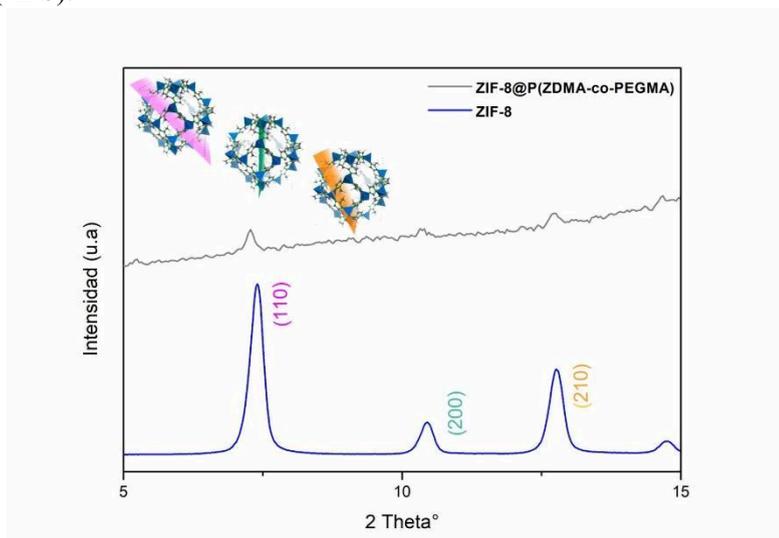


Figura 1. Difractograma de ZIF-8 vs ZIF-8@P(ZDMA-co-PEGMA)

[1] Ayala, S. (Eds) Hybrid Metal-Organic Framework and Covalent Organic Framework Polymers (36), 2021- The Royal Society of Chemistry

[2] J. Allegretto et al., Chem. Eur. J. 26 (2020) 12388-12396.



ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE UN NUEVO DERIVADO DE L-TIROSINA

M.R. Lopez Borda^{1,2*}, J. Sandobal¹, C. Iturriaga¹, J.M. Rey^{1,2}, F. Movilla^{1,2}, F. Di Salvo^{1,2}

¹Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Intendente Güiraldes 2160, Piso 3, Ciudad Universitaria, C1428EGA Buenos Aires

²CONICET-Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Intendente Güiraldes 2160, Piso 3, Ciudad Universitaria, C1428EGA Buenos Aires

*mrborda@qi.fcen.uba.ar

Palabras claves: AMINOÁCIDOS; INGENIERÍA CRISTALINA; QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Los aminoácidos son una fuente asequible de compuestos quirales enantioméricamente puros y plataformas muy versátiles para la síntesis de nuevas moléculas. Una de las modificaciones más utilizadas consiste en la formación de una base de Schiff reducida. Esta derivatización permite conservar la quiralidad, así como los grupos funcionales amino y ácido carboxílico, logrando un sistema sensible a cambios de pH en el medio, lo que permite acceder a sus correspondientes estados iónicos, y con una rica química supramolecular, al contar con grupos capaces de establecer interacciones intermoleculares fuertes y direccionales. Otra característica interesante es que, tanto en los aminoácidos como en sus derivados, pueden actuar como ligandos del tipo N,O- y, por lo tanto, ser empleados para la síntesis de compuestos de coordinación quirales.

En este trabajo se presenta un nuevo derivado del aminoácido L-Tirosina con *p*-tolualdehído, TyrTol (Fig. 1a), el cual fue caracterizado mediante diferentes espectroscopías y difracción de rayos X de monocristal. Los monocristales aptos para llevar a cabo la determinación estructural fueron obtenidos por difusión lenta de vapores de HCl en una solución de TyrTol en KOH 0,1 M. Este nuevo derivado cristaliza en su especie zwitteriónica, en el grupo espacial monoclinico *I*2 (5) cuyos parámetros de celda son: $a = 14.2382$ (8), $b = 5.9085$ (4), $c = 18.1243$ (11), $\alpha = 90$, $\beta = 102.515$ (7), $\gamma = 90$ (Fig. 1a). La morfología de los cristales es muy particular dado que se trata de agujas muy finas y frágiles (Fig. 1b). Al igual que su precursor, L-tirosina [1], y otros derivados obtenidos en el grupo previamente a partir de benzaldehído y piperonal [2], presentan un sintón supramolecular muy característico en donde se conserva un dímero establecido entre el carboxilato y el fenol (Fig. 1c). Si bien el fragmento orgánico se modifica a lo largo de esta familia de compuestos, se distingue un empaquetamiento similar en el cual se identifican regiones en las que predominan las interacciones que involucran a los anillos aromáticos y otras en la que se observan interacciones electrostáticas asistidas por puentes de hidrógeno.

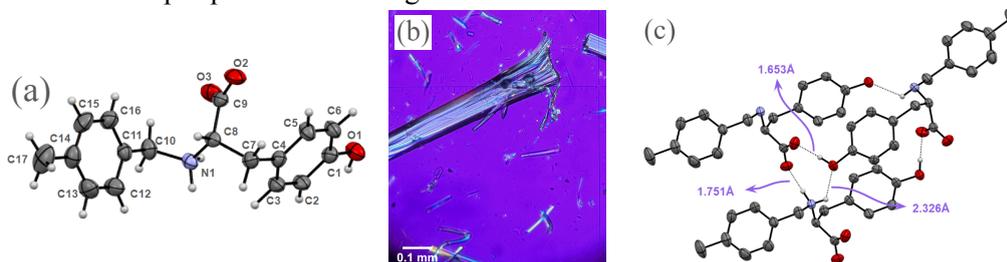


Figura 1 - (a) Estructura molecular de TyrTol, (b) Extremos de cristal obtenido, (c) Sintón supramolecular, solo se muestran los hidrógenos que participan en la construcción de dicho dímero para mayor claridad

[1] Y. Zhang, y col, ACS Nano 17 (2023) 2737.

[2] F. Movilla, J.M. Rey, C. Huck-Iriart, F. Di Salvo, Cryst. Growth Des. 21 (2021) 3487-3499



**UN MAPA COMPOSICIONAL DEL SUBSUELO, EL POTENCIAL DE UNA BASE DE DATOS
PARA LA CARACTERIZACIÓN DE VACA MUERTA.**

I. Loyza^{1*}, A. Guzzetti¹, C. Breard¹, S. Pugnaire¹, K. Irvicelli¹, M. Cipollone^{1,2}

¹YPF Tecnología (Y-TEC), Berisso (1923)

²IlyA, UNAJ

*ines.loyza@ypftecnologia.com

Palabras claves: MINERALOGÍA; BASE DE DATOS; XRD; VACA MUERTA

Este trabajo presenta la construcción de una base de datos mineralógicos del subsuelo, si bien su dimensión completa aborda todas las cuencas productivas del país por las incumbencias de Y-TEC, en esta publicación nos enfocamos a mostrar el mapa sobre el yacimiento de mayor potencial en la Argentina, Vaca Muerta.

Este mapa surge de un trabajo iniciado por YPF e Y-TEC desde hace más de una década. En la empresa se realizan estudios composicionales a partir de la difracción de rayos X. Se realiza el estudio de las fases cristalinas presentes en la roca, comúnmente llamado roca total (RT) y la identificación de agregados orientados obtenidas a partir de la fracción arcilla (FA), típicamente tamaños de partícula menores a 2 micrones. La metodología utilizada para obtener datos cuantitativos es en base al método de Rietveld [1]. Durante los años de trabajo incluidos en la publicación se utilizaron distintos softwares de uso libre, como es el caso de FULLPROF a comerciales como TOPAS y SIROQUANT. Para establecer homogeneidad en los diversos orígenes de datos, se realizaron trabajos comparativos [2].

El resultado más importante que se reporta es la construcción de una base de datos de VM con más de 2000 muestras analizadas. También se pueden obtener a partir de esta herramienta los minerales constituyentes, dónde se reportan más de 20 fases cristalinas.

Disponer de este volumen de datos y su ubicación, ofrece un enorme potencial para el análisis de datos siendo este repositorio una herramienta crítica para la resolución de problemas que estén vinculados con observación de variaciones composicionales a nivel regional. También, esta base, sirve para entrenar modelos predictivos que busquen determinar mineralogía a partir de otras medidas.

En la actualidad se encuentra en construcción, pero ya ofrece sus primeros resultados, desarrollo de algoritmos predictivos, seguimiento de parámetros a nivel regional, ubicación y distribución de minerales que producen incrustaciones entre otras cosas.

[1] Bish, DL. & JE Post. . American Mineralogist 78 (1993) 932-940.

[2] M.S. Conconi, M. Stabile, M.R. Gauna, N.M. Rendtorff, K. Irvicelli, I. Loyza, B. Epele, M. Cipollone. XV Reunión Anual de Cristalografía, Bariloche, Argentina 2019.



HYDROTHERMAL SYNTHESIS TO PREPARE FACETED [001] TiO₂ AND [001] TiO₂/OXOFLUORIDE MATERIALS WITH HIGH PHOTOCATALYTIC ACTIVITY

M. Manrique-Holguín^{1*}, K.G. Irvicelli², J.A. Donadelli², A. Canneva², J. Padró², N. Ronco², L.R. Pizzio¹, J.A. Rengifo-Herrera¹

¹Laboratory of Advanced Oxidation Processes and Photocatalysis (LAPh), Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA) (CCT-La Plata CONICET, UNLP, CICPBA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de la Plata, 47No. 257, 1900 La Plata

²CONICET, YPF TECNOLOGÍA S. A. Av. Del Petroleo s/n - (Entre 129 y 143), (1925) Berisso - Buenos Aires

*julianregifo@quimica.unlp.edu.ar

Palabras claves: FACET ENGINEERING; HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSIS; TiO₂

A hydrothermal synthesis procedure at 200°C was explored to prepare anatase TiO₂ nanosheets with a specific facet orientation using NaF (30 and 60% wt.). The concentration of NaF (with respect to Ti(OH)_x xerogel) was 30 and 60% wt. while the hydrothermal treatment time was 24 and 72 h. The obtained materials were characterized by XRD, XPS, TEM, and high-resolution TEM, and their photocatalytic evaluation was performed in the oxidation of malachite green (MG, a cationic triphenylmethane dye) and the reduction of nitrobenzene (NB) to aniline (AN) under UVA LED irradiation (365 nm). XRD characterization (Figure 1a and 1b) showed that materials synthesized in the absence of NaF were composed mainly of anatase (A) and brookite (B) crystalline structures (62% A, 38% B for Ti-24h and 68% A and 32% B for Ti-72h). Materials synthesized with NaF at 30% wt. and treatment time of 24h (TiF30-24h) and 60% and treatment time of 72 h (TiF60-72h) exhibited only anatase crystalline structure (100%). In contrast, those materials of TiF30-72h and TiF60-24h showed the presence of a new phase identified as sodium titanium oxyfluoride (TiOF, Na₅Ti₃O₃F₁₁), a ferroelectric material belonging to the family of chiolite. On the other hand, TEM micrographs (Figure 1c) revealed that the material TiF30-24h exhibited a morphology related to nanosheets and a specific [001] facet orientation. The other materials showed also the same feature. The photocatalytic oxidation reactions of MG and reduction of NB showed that the materials TiF30-24h and TiF30-72h exhibited the highest activity. Thus, we conclude that the presence of a specifically oriented facet [001] and the ferroelectric material TiOF significantly enhances the photocatalytic activity of these materials either in oxidative or reductive reactions.

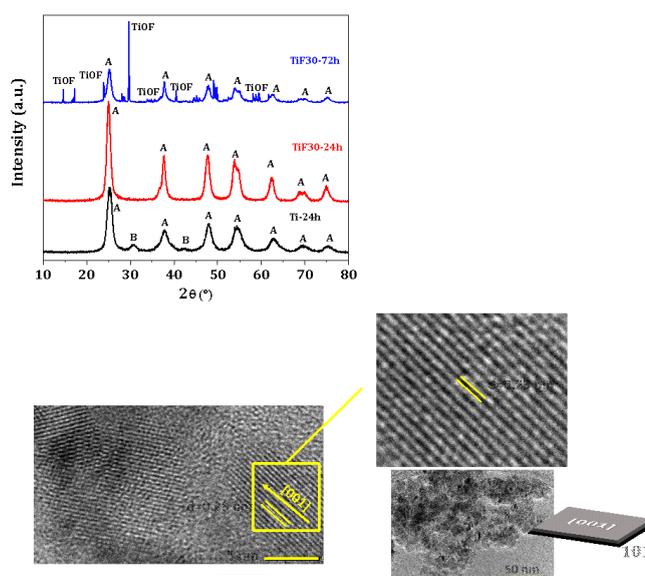


Figure 1. XRD pattern of samples prepared with (a) 30%wt. and (b) 60% wt. of NaF. (c) TEM and high-resolution TEM micrographs



**ANÁLISIS DE MATERIALES PARA RETENCIÓN SELECTIVA DE Li
POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X**

L. Mardones^{1,2}, J. Vega Castillo^{1,2*}, V. Raimundi¹, T. González Mues¹, C. Echaide¹, A. Floridia¹, C. Villa Pérez¹

¹YPF Tecnología, Berisso, Provincia de Buenos Aires

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET

*jesus.e.vegacastillo@set.ypf.com

Palabras claves: LITIO; AGUA DE PRODUCCIÓN; HIDRÓXIDO; LTO; HTO

Argentina es el cuarto mayor productor de Li a nivel mundial. Hay yacimientos de este metal en Jujuy, Salta, Catamarca y recientemente se descubrieron en Formosa. Sin embargo, los salares de esta última consisten en aguas de producción de yacimientos petroleros y tienen baja concentración de Li, lo que dificulta considerablemente su extracción usando métodos tradicionales. Surge entonces la alternativa de extraer este Li mediante retención selectiva por intercambio catiónico y/o por adsorción.

En Y-TEC se vienen desarrollando materiales para retención selectiva de Li por intercambio catiónico y por adsorción, desde escala de laboratorio para pasar a escala de planta piloto y finalmente disponibilizar uno o varios métodos para la extracción de Li en los salares de baja concentración de la provincia de Formosa.

En este trabajo presentamos la síntesis y caracterizaciones estructurales, microestructurales, químicas y pruebas de desempeño de dos tipos de materiales con capacidad de retención de Li.

Por un lado, el H_2TiO_3 (HTO) es un compuesto laminar que tiene capacidad de retener iones de Li^+ por intercambio directo de cationes H^+ por Li^+ , dando lugar a Li_2TiO_3 (LTO) [1]. Las pruebas de capacidad de retención selectiva de Li en del HTO han arrojado valores de un 99% de retención después de 4 horas de tratamiento. Por otra parte, los ensayos de elución arrojaron un 99% de liberación del Li contenido en el material.

La caracterización por Difracción de Rayos X (XRD) de polvos ha permitido identificar las fases puras HTO y LTO, marcando los claros cambios estructurales que sufre el compuesto durante el tratamiento ácido para la obtención de HTO, así como también, verificar su estructura posterior al intercambio catiónico.

Por otro lado, se ha identificado el hidróxido laminar doble $\text{LiAl}_2(\text{OH})_7 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ como material con alta capacidad de adsorción de iones de Li^+ por un mecanismo de retención entre capas atómicas [2]. Se ha logrado sintetizar este material con alta pureza, revelada por XRD. Los experimentos de adsorción-desorción muestran capacidades de retención selectiva del 90% del Li. La composición del material ha sido estudiada por Espectroscopía de Rayos X Dispersiva en Energía (EDS). También se complementó el análisis de la estructura cristalina de este hidróxido laminar por Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM) de alta resolución (HRTEM) y por Difracción de Electrones (ED).

Ambos tipos de materiales representan interesantes opciones para el desarrollo de un método de extracción de Li de salmueras de baja concentración, de bajo costo y amigable con el ambiente.

[1] R. Chitrakar et al., Dalton Trans. 43 (2014) 8933.

[2] Y. Zhong et al., Desalination 505 (2021) 114983.



INGENIERÍA CRISTALINA EN UNA RED DE COORDINACIÓN 2D DE Y^{3+} DOPADA CON Tb^{3+} COMO ESTRATEGIA PARA EL DESARROLLO DE NUEVOS SENSORES LUMINISCENTES

R.J. Martínez-Villarroel^{1*}, M.P. Montaña², S. Miskoski³, W.A. Massad³, G.E. Gomez¹, M.C. Bernini¹

¹Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI, CONICET-UNSL), Almirante Brown 1455, San Luis (5700)

²Instituto de Química de San Luis (INQUISAL, CONICET-UNSL), Av. Ejército de los Andes 950, San Luis (5700)

³Instituto para el Desarrollo Agroindustrial y de la Salud (IDAS, CONICET-UNRC), Ruta Nac. 36 Km 601, Río Cuarto (5800)

*rosmaira0794@gmail.com

Palabras claves: INGENIERÍA CRISTALINA; RED DE COORDINACIÓN; SENSOR LUMINISCENTE

Una red de coordinación (CN) es una estructura cristalina que se extiende en 2 o 3 dimensiones a través de entidades de coordinación repetidas, constituidas por centros metálicos unidos por ligandos. La ingeniería cristalina permite la elección de los bloques constituyentes, posibilitando la síntesis de materiales útiles en catálisis, detección, purificación y almacenamiento de gases [1]. Cuando se emplean iones de tierras raras (RE: Eu^{3+} , Tb^{3+}), junto con ciertos ligandos orgánicos, es posible obtener CNs con propiedades luminiscentes.

En un estudio previo [2], se reportó que la CN de fórmula $[Y_{0,95}Tb_{0,05}(\text{Salicilato})(\text{Succinato})_{0,5}(\text{H}_2\text{O})]$ ($Tb@YSS$) exhibe luminiscencia de color verde ($\lambda = 542$ nm), tras la excitación UV. Esta propiedad la hace interesante para su estudio como sensor mediante el *quenching* de la luminiscencia. Para aumentar la afinidad de la CN por analitos de interés biológico, se sustituyó parcialmente el ligando salicilato por su análogo funcionalizado 4-aminosalicilato (4-ASA) (Figura 1a) en proporciones del 10% al 40% molar. El análisis por PXRD reveló que $Tb@YSS$ -4ASA (10-30%) mantiene un carácter isoestructural con la CN original, mientras que un porcentaje mayor de sustitución genera impurezas cristalinas (ver Figura 1b). Por otra parte, la caracterización por espectroscopía de FT-IR confirmó la presencia de grupos amino, notándose un incremento en la intensidad de las bandas de $\nu(\text{N-H})$ en concordancia con el grado de incorporación del ligando 4-ASA. Además, las micrografías de SEM revelaron morfologías coincidentes con el material original (ver Figura 1c).

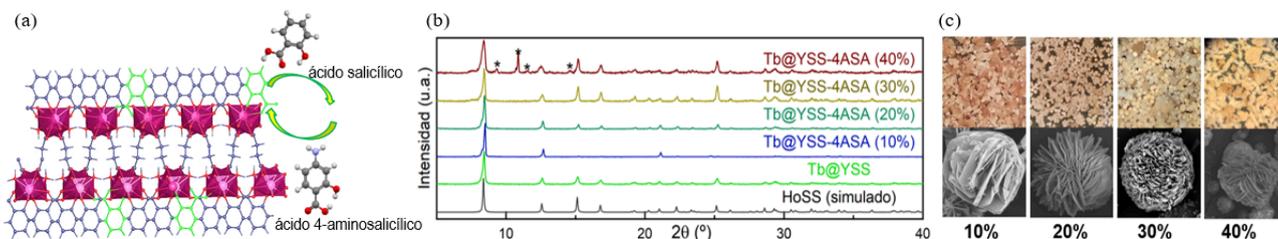


Figura 1. CNs rediseñadas: (a) Esquema de la modificación por ingeniería cristalina de la estructura de la CN (b) Difracción de Rayos X de polvos (c) Fotografías y micrografías SEM.

Se estudió la estabilidad estructural de las CNs en soluciones con pH controlado, encontrando que son estables entre pH 3 y 11. Además, se evaluaron como sensores de aminoácidos, revelando que $Tb@YSS$ -4ASA (20%) tiene mayor sensibilidad que $Tb@YSS$ para detectar 5-hidroxitriptófano (5-HTP). Los espectros de emisión y los tiempos de vida de la luminiscencia, demuestran que el 5-HTP provoca un *quenching* estacionario ($K_s = 697 \text{ M}^{-1}$) sobre $Tb@YSS$ -4ASA (20%), evidenciando su potencial como sensor luminiscente, con un límite de detección (LOD) de $1,52 \cdot 10^{-4} \text{ M}$ y de cuantificación (LOQ) de $5,06 \cdot 10^{-4} \text{ M}$.

[1] S. Mukherjee, M.J. Zaworotko, Trends Chem. 2 (2020), 506-518.

[2] A.A. Godoy, G.E. Gomez, A. Kaczmarek, R. Van Deun, O. Furlong, F. Gándara, M.A. Monge, M.C. Bernini, G.E. Narda, J. Mater. Chem. C 5 (2017) 12409-12421.



EFFECTO DEL AGREGADO DE ADITIVOS ECOAMIGABLES SOBRE LAS PROPIEDADES DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS DE ÓXIDOS DE HIERRO

L.D. Matilla^{1*}, M.V. Fuchs¹, P.A. Calderón¹, P.M. Botta¹, M.A. Fanovich¹

¹Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), CONICET-UNMdP, Av. Colón 10850, Mar del Plata

*ldmatilla@gmail.com

Palabras claves: NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS; ÓXIDO DE HIERRO; COPRECIPITACIÓN

La síntesis de nanopartículas magnéticas (NM) de óxidos de hierro ha despertado un gran interés en las últimas décadas debido a sus diversas aplicaciones, destacando su uso como materiales teranósticos en el ámbito biomédico. En este estudio, se sintetizaron nanopartículas magnéticas de óxido de hierro mediante el método de coprecipitación [1] adaptado para la incorporación de aditivos. Se estudió el efecto de tres aditivos sobre el rendimiento de fases magnéticas, morfología, tamaño y distribución de tamaños de las partículas obtenidas: ácido oleico (AO), y dos extractos obtenidos a partir de flores de *Cannabis sativa* (CS) y del residuo cervecero Spent Hop (SH). El AO se agregó para mejorar la dispersión de las nanopartículas en solución, dado su carácter tensioactivo. Los extractos, agregados para estabilizar y funcionalizar las NM, poseen agentes antioxidantes naturales que tienen actividad biológica como anticancerígeno, antioxidante, antiinflamatorio, antibacteriano, entre otras propiedades.

Las NM obtenidas fueron caracterizadas mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM), dispersión dinámica de luz (DLS), difracción de rayos X (DRX), espectroscopía FTIR, análisis termogravimétrico (ATG) y magnetometría de muestra vibrante (VSM).

Los resultados de los difractogramas DRX (Fig. 1) indicaron en general la formación de la fase magnetita, Fe_3O_4 , aunque la presencia de la fase maghemita $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ no pudo ser descartada, debido a su similitud estructural con la magnetita. El tamaño de cristalito de las NM, estimado a partir de la ecuación de Scherrer, resultó entre 3 y 7 nm, según el aditivo empleado. Las imágenes de TEM muestran aglomerados de NM de un tamaño medio entre 5 y 10 nm. Se observa una buena respuesta magnética de las nanopartículas, con y sin aditivos, que las hacen aplicables en sistemas biomédicos.

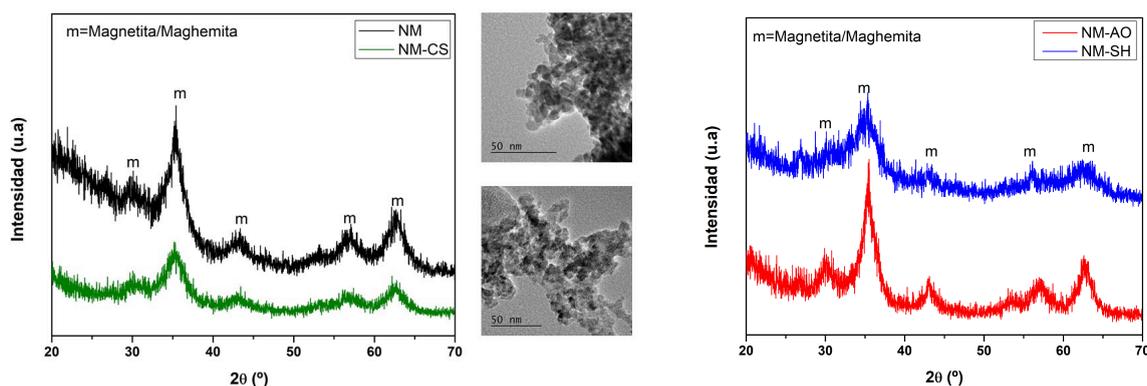


Figura 1. Patrones de DRX e imágenes de TEM de las NM desnudas y modificadas con los aditivos

[1] R.P. Gambhir, S.S. Rohiwal, A.P. Tiwari. Appl. Sur. Sci. Adv. 11 (2022) 100303.



MECANISMOS DE CRECIMIENTO DE NANOCOMPUESTOS BASADOS EN HIDRÓXIDOS LAMINARES. UN ESTUDIO IN SITU CON DIFRACCIÓN Y ABSORCIÓN DE RAYOS X

M. Mizrahi^{1,2*}, C. Jaramillo-Hernández³, V. Oestreicher³, C. Huck-Iriart⁴, G. Abellán³

¹Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)-Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas Universidad Nacional de La Plata, CCT La Plata - CONICET, diagonal 113 y 64, 1900, La Plata

²Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, calle 1 esq. 47, 1900, La Plata

³Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia, Catedrático José Beltrán 2, 46980, Paterna, Valencia, España

⁴ALBA Synchrotron light source, Carrer de la Llum 2-26, 08290 Cerdanyola del Vallès, Barcelona, España

*mizrahi@fisica.unlp.edu.ar

Palabras claves: HIDRÓXIDOS LAMINARES; NANOCOMPUESTOS; DRX-XANES IN SITU

Los nanocompuestos (NCs) basados en nanopartículas metálicas con matrices de carbono, obtenidos a partir de precursores orgánicos e inorgánicos, se destacan como componentes clave en supercapacitores híbridos, ofreciendo soluciones versátiles para diversas aplicaciones energéticas.[1.2] En este trabajo se estudió el mecanismo de crecimiento de hidróxidos laminares (LHs) híbridos basados en Co como precursores de nanocompuestos (NCs), y cómo cambios en la longitud de los aniones dicarboxílicos en las capas interlaminares afecta a la formación de los NCs (Figura 1). Para este estudio se realizaron medidas de difracción de rayos X (DRX) en polvo y espectroscopía de absorción de rayos X (XANES), ambas *in situ*, lo que proporcionó información sobre la dinámica compleja de formación de los nanocompuestos. Durante los experimentos, DRX se pudo monitorear la transición estructural de la fase laminar de hidróxido a una fase de óxido metálico a medida que la temperatura aumentaba. A las temperaturas más altas, DRX reveló diferencias en la recristalización entre muestras con diferentes longitudes de cadena orgánica empleada en la síntesis. Al mismo tiempo, XANES proporcionó información detallada sobre el estado de oxidación y la coordinación de los elementos metálicos en las muestras, lo que permitió detectar la reducción del cobalto y la formación de partículas metálicas y la completa conversión en NCs. La combinación de estas técnicas permitió seguir en tiempo real las dinámicas de transformación durante la síntesis, ofreciendo una visión integral de cómo la cantidad de carbono y su estructura inicial, influyen en el mecanismo de formación de los NCs. Mientras DRX identificó cambios estructurales macroscópicos, XANES profundizó en las modificaciones electrónicas y atómicas, mostrando cómo la presencia de carbono afecta la reducción del Co y, en consecuencia, la formación final de los NCs. Estos hallazgos subrayan la importancia de utilizar técnicas como DRX y XANES de forma simultánea para comprender los mecanismos de crecimiento de los nanocompuestos y, de esta forma, poder diseñar materiales de manera más racional.

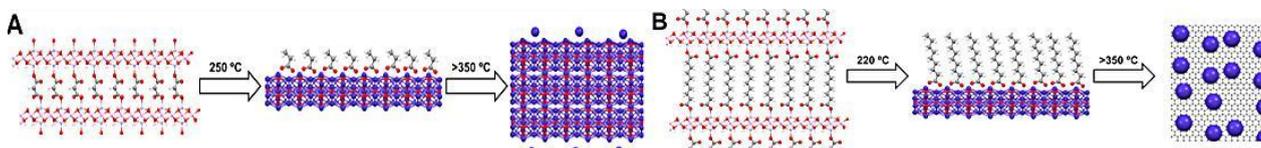


Figura 1. Mecanismo de crecimiento de la fase laminar híbrida para una cadena orgánica corta (A) y una cadena orgánica larga (B), conduciendo a la formación de la fase de óxido metálico en ambos casos (etapa intermedia), y posterior cristalización (A), y la formación del nanocompuesto metálico (B).

[1] V.V. Khedekar, S.M. Zaeem, S.Das, Adv. Mater. Lett. 9 (2018) 2-19.

[2] D. Yang, Application of Nanocomposites for Supercapacitors: Characteristics and Properties. In Nanocomposites - New Trends and Developments; Ebrahimi, F., Ed.; InTech (2012).



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDOS DE CERIA DOPADA CON Zr, La Y Pr PARA LA REUTILIZACIÓN CATALÍTICA DE BIOGÁS

L. Monroy^{1*}, M.G. Zimicz¹, F.D. Prado¹

¹Instituto de física del Sur, Departamento de Física UNS Av. L.N. Alem 1253(8000)-Bahía Blanca

*monroylina22@gmail.com

Palabras claves: CERIA; DRX; BIOGÁS; CATÁLISIS HETEROGÉNEA

La reutilización de biogás implica la conversión de $\text{CH}_{4(g)}$ y $\text{CO}_{2(g)}$ en una mezcla de mayor valor agregado. Esta conversión se da mediante la reacción de reformado en seco y para que ocurra es necesario contar con materiales catalíticamente activos [1]. El $\text{CeO}_{2(s)}$ dopado con praseodimio es un conductor mixto, con estructura cristalina tipo fluorita. El dopaje con $\text{Pr}^{3+/4+}$ es particularmente interesante porque promueve la formación de vacancias de oxígeno a $T > 400\text{ }^\circ\text{C}$, lo cual incrementa los valores de conductividad iónica [3]. Además, el dopado de la ceria con Zr mejora el intercambio de los oxígenos de red con la atmósfera circundante [4].

Se sintetizaron tres series de óxidos de ceria dopada con Zr, La y Pr, donde el contenido de La y Zr permanece fijo y el contenido de Pr varía ($\text{Zr}_{0.1}\text{Ce}_{0.9-x}\text{Pr}_x\text{O}$, $\text{Zr}_{0.2}\text{Ce}_{0.8-x}\text{Pr}_x\text{O}$ y $\text{La}_{0.2}\text{Ce}_{0.8-x}\text{Pr}_x\text{O}$, con $x=0.1, 0.4, 0.8$ y 0.9). Los materiales fueron preparados por el método de síntesis por complejación de cationes con ácido cítrico. Una vez obtenidos los óxidos, se sometieron a tratamientos térmicos a distintas temperaturas (450, 600, 800 y 1000 $^\circ\text{C}$). Las calcinaciones se hicieron en aire estático a una velocidad de calentamiento constante de 5 $^\circ\text{C}/\text{min}$, manteniendo la temperatura final por 1 hora. La caracterización estructural de todos los materiales obtenidos se realizó por el método de difracción de rayos X seguido por un refinamiento de la estructura mediante el método de Rietveld, de donde se obtienen los valores del tamaño de cristalita, parámetros de red y microdeformaciones de los distintos materiales sintetizados. El análisis morfológico de los materiales se hizo mediante la técnica de microscopía electrónica de barrido (SEM).

Finalmente, se obtuvieron doce óxidos sintetizados y se determinó que todos tienen estructura cúbica (Fm3m). Los materiales tratados térmicamente a 450 $^\circ\text{C}$ resultaron de tamaño nanométrico, y se evidenció el crecimiento de cristalita con el aumento en la temperatura de calcinación. También se observó una buena correlación entre el parámetro de celda y la variación de la concentración de Pr en las series de materiales sintetizados. Para todas las series de materiales se observó un incremento en el parámetro de red con el aumento de la concentración de Pr.

[1] T. Gomes de Araújo Moreira et al. Fuel 287 (2021) 119536.

[2] D. Ballesteros-Plata et al., Fuel 308 (2022) 121996.

[3] R. Chiba, H. Taguchi, T. Komatsu, H. Orui, K. Nozawa, H. Arai, Solid State Ion. 197 (2011) 42-48.

[4] M.G. Zimicz et al., J. Phys. Chem. C 119 (2015) 19210-19217.



MATERIALES DE Li_3BO_3 MODIFICADOS CON NaOH PARA LA CAPTURA DE CO_2

M.D. Morales^{1*}, P. Arneodo Larochette¹, F.C. Gennari¹

¹Departamento Físicoquímica de Materiales, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, San Carlos de Bariloche, Río Negro

*mdolo.morales@gmail.com

Palabras claves: DIÓXIDO DE CARBONO; TRIBORATO DE LITIO; PROPIEDADES DE CAPTURA

El desarrollo de materiales aplicados a la captura y almacenamiento de CO_2 (CCS por sus siglas en inglés) representa una tecnología atractiva para mitigar las emisiones de dicho gas al ambiente y así disminuir los efectos del cambio climático [1]. Por su parte, el triborato de litio (Li_3BO_3) modificado con nitritos de metales alcalinos [2] y fluoruros de sodio y potasio [3], ha sido propuesto como un sorbente sólido de temperatura intermedia (500-650 °C) con propiedades destacables respecto a su capacidad de captura, cinética y estabilidad.

Para este trabajo se sintetizó el material Li_3BO_3 modificado con diferentes concentraciones de NaOH a partir de Li_2CO_3 y H_3BO_3 bajo condiciones experimentales atractivas: corto tiempo de molienda mecánica, tratamiento térmico a baja temperatura (600 °C por 1 hora), reactivos comerciales de fácil manipulación y bajo costo. Se estudió el efecto de la cantidad de aditivo sobre los parámetros termodinámicos del Li_3BO_3 mediante la determinación de isothermas de presión vs. composición (curvas PCI). Las muestras fueron caracterizadas mediante DRX, SEM, EDS y TG-DSC, mientras que las propiedades de captura se determinaron en un sistema termogravimétrico (TG-HP50, TA Instruments) capaz de operar en flujo gaseoso y a diferentes presiones de CO_2 . Se encontró que la captura de CO_2 ocurre en dos etapas y se identificaron las fases presentes en cada una de ellas (Figura 1 A y B). En la figura 1 C se presenta la morfología de la muestra con 0,25 M de NaOH antes (imagen izquierda) y después (imagen derecha) del proceso de carbonatación.

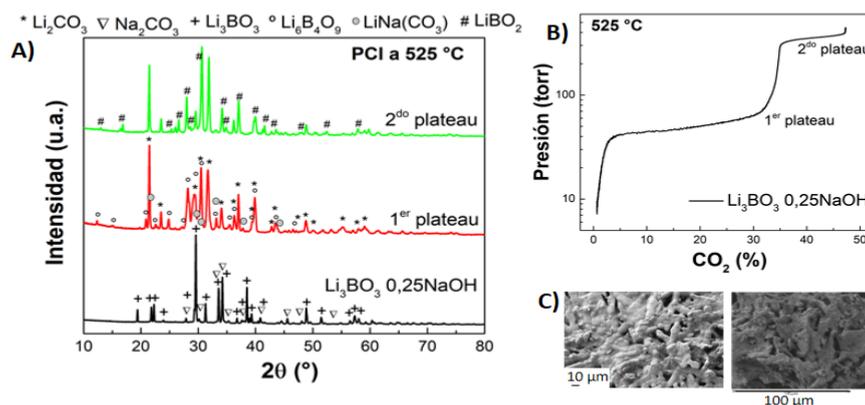


Figura 1. A) Difractogramas adquiridos para Li_3BO_3 con 0,25 M de NaOH , muestras del 1^{er} y 2^{do} plateau, B) Curva PCI medida a 525 °C para la muestra Li_3BO_3 con 0,25 M de NaOH , C) Imágenes SEM del material Li_3BO_3 con 0,25 M de NaOH (izquierda) y luego de 20 ciclos de captura/liberación de CO_2 (derecha).

Los materiales modificados con bajo contenido de NaOH presentaron un excelente desempeño para su aplicación en procesos de postcombustión.

[1] Turgut M. Gür, Prog. Energy Combust. Sci. 89 (2022) 100965-101020.

[2] T. Harada, T. Hatton, J. Mater. Chem. A 5 (2017) 22224-22233.

[3] C. Villa-Pérez, P. Arneodo Larochette, D.B. Soria, F.C. Gennari, Chem. Eng. J. 450 (2022) 138118-138129.



EFECTO DEL DOPAJE CON Al EN LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ÓPTICAS Y ELÉCTRICAS DE PELÍCULAS DELGADAS DE ZnO

L.E. Morinigo^{1*}, M.R. Tejerina¹

¹CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica, (CIC-CONICET-UNLP), M. B. Gonnet, Argentina.
*luismorinigo@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras claves: ÓXIDO DE ZINC; ALUMINIO; DOPAJE; PELÍCULAS DELGADAS

Las películas delgadas de óxido de zinc (ZnO) han sido objeto de amplia investigación debido a sus diversas aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, gracias a su notable transparencia, conductividad y estabilidad química [1,2]. Sin embargo, la mejora continua de sus propiedades eléctricas y estructurales sigue siendo un área de interés significativa en la investigación de materiales.

En este estudio, investigamos el efecto del dopaje con aluminio (Al) en películas delgadas de ZnO fabricadas mediante la técnica de spray pirólisis. El dopaje con Al se ha reconocido como una técnica eficaz para modificar las propiedades eléctricas y ópticas de los materiales semiconductores, lo que puede resultar en una mejora significativa de su rendimiento en diversos dispositivos [3,4].

Mediante la fabricación de películas de ZnO dopadas con diferentes concentraciones de Al en la solución de partida (0%, 0.5% y 1%), se investigó como la presencia de Al influye en las propiedades eléctricas y estructurales de las películas delgadas de ZnO. Se realizaron medidas de resistividad para evaluar las propiedades eléctricas, mientras que los análisis de microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía de fuerza atómica (AFM) proporcionaron información detallada sobre la morfología y estructura superficial de las películas.

Los resultados revelaron cambios en la resistividad de las películas de ZnO con la adición de Al, observando que a mayor concentración de Al menor resistividad. Además, los análisis SEM y AFM mostraron variaciones en la morfología y la topografía de las películas dopadas en comparación con las películas de ZnO no dopadas.

En conclusión, este estudio ofrece una comprensión más profunda de cómo el dopaje con Al puede influir en las propiedades eléctricas y estructurales de las películas delgadas de ZnO, lo que abre nuevas posibilidades para su aplicación en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos avanzados.

[1] Z. L. Wang, J. Condens. Matter Phys. 16 (2004) 829-858.

[2] A. Janotti and A. G. Van de Walle, Rep. Prog. Phys 72 (2006) 126501.

[3] D. C. Look, Int. J. Mater. Sci. (2001) 383-387.



CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE SALES SULFÓNICAS DE SULFAMETOXAZOL

A.B. Moroni^{1,2*}, T. Bottoso², D.F. Lionello³, D.R. Vega³, T.S. Kaufman^{1,2}, N.L. Calvo^{1,2}

¹Instituto de Química Rosario (IQUIR-CONICET), Rosario (2000)

²Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR), Rosario (2000)

³Departamento Física de la Materia Condensada, Centro Atómico Constituyentes (CNEA), Buenos Aires, (1650)

*moroni@iquir-conicet.gov.ar

Palabras claves: SULFAMETOXAZOL; SALES; DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL

Sulfametoxazol (SMX) es un antibacteriano cuya biodisponibilidad y eficacia se ven disminuidas por la baja solubilidad que presenta en medios acuosos [1]. Con el objetivo de mejorar esta característica, se prepararon sales y se obtuvieron, por primera vez, monocristales de tosilato (SMX•Ts) y mesilato de SMX (SMX•Ms), cuyas estructuras fueron elucidadas mediante difracción de rayos X de monocristal (SCXRD). Además, se amplió la caracterización de estas fases por difracción de rayos X de polvo (PXRD), calorimetría diferencial de barrido (DSC), análisis termogravimétrico (TGA) y por métodos espectroscópicos. En la Figura 1 se muestra que, en ambos casos, las unidades asimétricas contienen dos pares de iones SMX⁺ y sus correspondientes contraiones unidos por interacciones de enlaces de hidrógeno N⁺-H...O⁻.

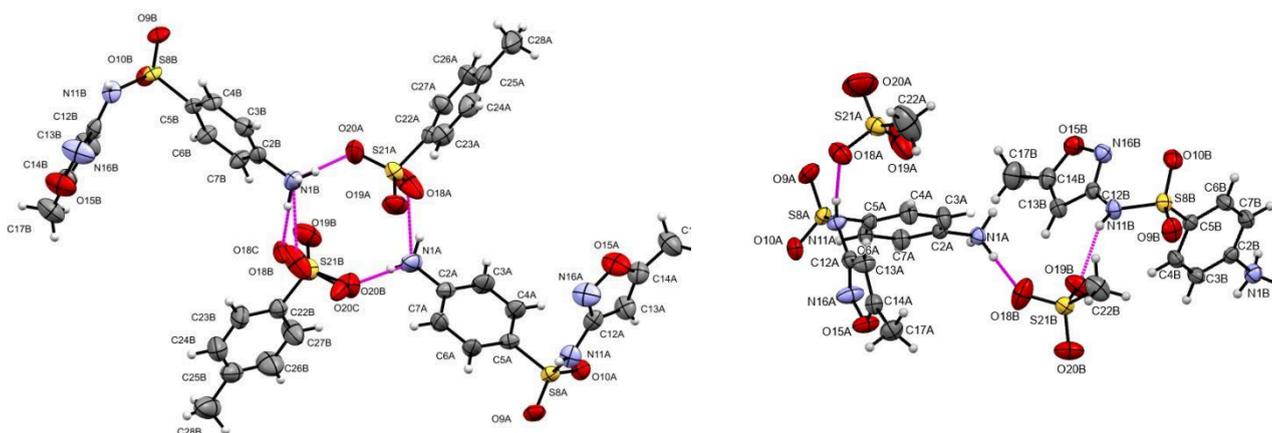


Figura 1. Unidades asimétricas de A) SMX•Ts y B) SMX•Ms. Los enlaces de hidrógeno se muestran con líneas de color magenta (—).

La estructura de SMX•Ts se resolvió y refinó mediante SCXRD a 298 K en el grupo espacial monoclinico $P 2_1/c$ y $Z = 8$, parámetros de celda: $a = 25,9749(12) \text{ \AA}$, $b = 5,3773(3) \text{ \AA}$, $c = 29,6489(16) \text{ \AA}$, $\alpha = 90,0^\circ$, $\beta = 112,198(2)^\circ$, $\gamma = 90,0^\circ$ y $V = 3834,3(4) \text{ \AA}^3$. Por otro lado, SMX•Ms se resolvió y refinó a 298 K en el grupo espacial triclinico $P\bar{1}$ y $Z = 4$, parámetros de celda: $a = 10,0407(2) \text{ \AA}$, $b = 11,0971(2) \text{ \AA}$, $c = 15,3185(3) \text{ \AA}$, $\alpha = 93,709(10)^\circ$, $\beta = 104,591(10)^\circ$, $\gamma = 109,183(10)^\circ$ y $V = 1539,63(5) \text{ \AA}^3$. Los difractogramas PXRD de los lotes a granel de ambas fases fueron consistentes con los difractogramas teóricos calculados de las estructuras refinadas.

La curva de DSC de SMX•Ts presentó un evento exotérmico con $T_{\text{onset}} = 207,0 \text{ }^\circ\text{C}$ que corresponde con el inicio de su degradación según TGA. Contrariamente, la curva de DSC del SMX•Ms arrojó una endoterma ($T_{\text{onset}} = 202,2 \text{ }^\circ\text{C}$) seguida de una exoterma asociada a degradación según TGA. Por otro lado, los espectros en el infrarrojo medio y cercano de las nuevas sales mostraron bandas diferenciales útiles para la identificación inequívoca del compuesto con respecto a sus componentes individuales.

En conclusión, se caracterizó, resolvió y refinó con éxito dos nuevas sales de SMX.

[1] M. Markovic, M. Zur, I. Ragatsky, S. Cvijic, *Pharmaceutics* 12 (2020) 1175.



ALCOXIBENZOATOS DE COBRE CON ESTRUCTURA *PADDLE-WHEEL*: INFLUENCIA DEL LIGANDO AXIAL Y ANALISIS DE LA CORRELACIÓN MAGNETO-ESTRUCTURAL

F. Müller¹, M. Marziali-Bermudez², P. Alborés¹, R. Baggio³, F.D. Cukiernik^{1*}

¹UBA-FCEN-DQIAQF y CONICET-UBA-INQUIMAE

²DF-FCEN-UBA e IFBA-CONICET

³CAC-CNEA

*fabio.cukiernik.inorganica@gmail.com

Palabras claves: CARBOXILATOS DE COBRE; PROPIEDADES MAGNÉTICAS; CORRELACIÓN MAGNETO-ESTRUCTURAL

La inmensa mayoría de los carboxilatos de cobre conocidos a la fecha con relación $\text{Cu(II)/RCO}_2^- = 1:2$ son compuestos binucleares $\text{Cu}_2(\text{O}_2\text{CR}_{\text{eq}})_4(\text{L}_{\text{ax}})_2$ que presentan estructura *paddle-wheel*, con los cuatro carboxilatos puenteando en posición ecuatorial los dos centros de Cu(II), y la presencia eventual de un ligando L (solvente u otro) en posición axial.[1] En muy pocos casos, se han hallado estructuras de mayor nuclearidad: trímeros y hexámeros.[2] Se ha sugerido que la formación de *clusters* de nuclearidad elevada podría estar favorecida por la presencia de carboxilatos con R_{eq} voluminosos. Para examinar la validez de esta hipótesis, encaramos la síntesis y caracterización de una serie de carboxilatos de cobre(II) con di- y tri-alcoxibenzoatos abreviados como $x,y,z\text{-BmOCn}$ (benzoato conteniendo m cadenas alcoxi- de n átomos de C cada una en las posiciones x,y,z).

De todos los compuestos preparados, logramos cristalizar y caracterizar estructuralmente tres, cuyas estructuras moleculares se presentan en la Figura: $\text{Cu}_2(3,4\text{-B2OC2})_4(\text{EtOH})_2$, $\text{Cu}_2(3,4\text{-B2OC2})_4(\text{ACN})(\text{H}_2\text{O}) \cdot 3\text{ACN}$ y $3,5\text{-Cu}_2(3,5\text{-B2OC1})_4(\text{AcOEt})_2$. Los tres presentaron estructura binuclear *paddle-wheel* con la posición axial ocupada por solvente (EtOH = etanol; ACN = acetonitrilo; AcOEt = acetato de etilo; en el caso de ACN, coexisten entidades binucleares con 2 aguas o 2 ACN axiales), lo cual nos lleva a proponer que los solventes coordinantes favorecen la estructura binuclear por sobre las de oligómeros superiores. El comportamiento magnético del compuesto $\text{Cu}_2(3,4\text{-B2OC2})_4(\text{EtOH})_2$, muestra un acoplamiento antiferromagnético ($2J = -288 \text{ cm}^{-1}$) entre los dos centros de Cu(II) de $S = 1/2$. Dicho valor encuadra adecuadamente en una correlación magneto-estructural propuesta hace tiempo por Kato y Muto [3] –basada en la pérdida de solapamiento entre orbitales magnéticos cuando el puente carboxilato pierde planaridad-, para cuyo análisis proponemos en este trabajo la definición de un parámetro más elaborado que permite una potencial generalización.

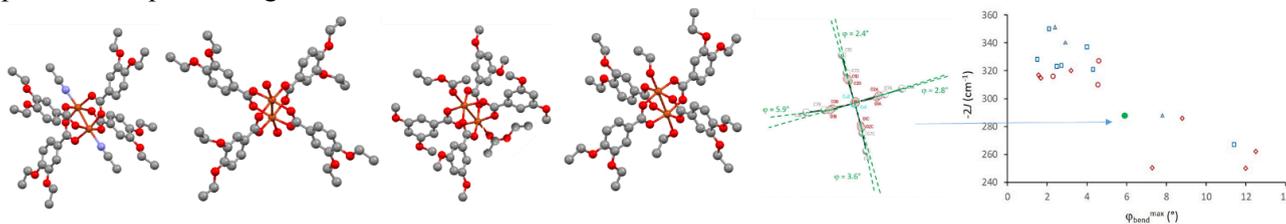


Figura 1. De izq. a der.: Estructuras moleculares de $\text{Cu}_2(3,4\text{-B2OC2})_4(\text{ACN})_2$, $\text{Cu}_2(3,4\text{-B2OC2})_4(\text{H}_2\text{O})_2$, $\text{Cu}_2(3,5\text{-B2OC1})_4(\text{AcOEt})_2$, y $\text{Cu}_2(3,4\text{-B2OC2})_4(\text{EtOH})_2$, ángulos que caracterizan la no-planaridad del carboxilato significativa para la correlación magneto-estructural y posición del compuesto en la misma.

[1] M. Mikuriya, C. Yamakawa, K. Tanabe, R. Nukita, Y. Amabe, D. Yoshioka, R. Mitsuhashi, R. Tatehata, H. Tanaka, M. Handa, M. Tsuboi, Magnetochemistry 7 (2021) 35-40.

[2] M.A. Castro, M. Rusjan, D. Vega, O. Peña, T. Weyhermüller, F.D. Cukiernik, L. D. Slep, Inorg. Chim. Acta 374 (2011) 499-505.

[3] T. Kawata, H. Uekusa, S. Ohba, T. Furukawa, T. Tokii, Y. Muto, M. Kato, Acta Cryst. B48 (1992) 253-261.



**REDES CRISTALINAS DE DITIOCARBAMATOS:
ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES MEDIANTE NBO Y QTAIM**

E. Narváez^{1*}, S. Ulic^{1,2}, J. Jios³, G. Echeverría⁴, O. Piro⁴

¹CEQUINOR (CONICET, CIC, UNLP), Bvd. 120 N°1465, (1900) La Plata

²Departamento de Cs. Básicas, UNLu, Rutas 5 y 7, Luján, Argentina

³Laboratorio UPL (UNLP-CIC), Cno. Centenario e/505 y 508, Gonnet y Dpto. de Química, Fac. de Cs. Exactas, UNLP, 47 esq. 115, La Plata

⁴Dpto de Física, Fac. de Cs. Exactas, UNLP e IFLP (CONICET), C.C. 67, La Plata

* gabrielnarvaez@quimica.unlp.edu.ar

Palabras claves: DITIOCARBAMATOS; INTERACCIONES; NBO; QTAIM

El estudio de compuestos conteniendo el anillo cromona y ditiocarbamato (Figura 1a) ha sido de interés por su amplio espectro de aplicaciones.[1,2] Si bien el número de compuestos reportados con estas dos familias es escaso, presentan propiedades biológicas prometedoras.[3] Continuando con el estudio de moléculas con estos grupos estructurales, se sintetizaron dos nuevos compuestos (1 y 2) (Figura 1a)

mediante la reacción de bromometilcromonas con la sal de sodio del ácido N,N-dietilditiocarbámico. Una vez aislados y purificados se obtuvieron cristales adecuados, cuyas estructuras fueron resueltas por difracción de rayos-X de monocristal. En este trabajo se empleó el análisis de orbitales naturales de enlaces (NBO) y la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM) para caracterizar y cuantificar las interacciones intra e intermoleculares de 1 y 2.

El análisis QTAIM de la densidad de carga se realizó sobre los monómeros y los dímeros mostrados en la Figura 1 (b-c) respectivamente. Se identificaron los caminos de máxima densidad de carga que conectan los pares de átomos interactuantes a través de puntos críticos de enlace (PCE), asociados a las principales interacciones intra (Figura 1b y 2b) e intermoleculares. En los monómeros, éstas interacciones son responsables de la conformación adoptada por los compuestos. En 1 se encontraron tres PCEs (interacciones intramoleculares) del tipo C-H...A (A=S, F), mientras que en 2 hay cuatro PCEs del tipo C-H...S. En ambos casos estas interacciones se caracterizan por ser del tipo van der Waals, excepto S2...H11 en 2 que puede considerarse un enlace de hidrógeno débil.[4] Adicionalmente, el estudio por NBO mostró que la contribución a la energía por transferencia de carga de estas interacciones varía entre 4,8 y 6,6 kJ/mol para 1, mientras que en 2 se encuentran entre 6,3 y 27,7 kJ/mol, siendo este último valor correspondiente a la interacción (S2...H11). Por otro lado, los PCEs asociados a las interacciones intermoleculares, responsables del empaquetamiento cristalino (Figura 1c), resultaron ser del tipo van der Waals. El contacto O2...C2 es el más relevante en 1, mientras que en 2 las interacciones más importantes son F1...F2, O1...F1 y O2...H2. El análisis de NBO reveló que la energía por transferencia de carga de estas interacciones es de 1,38 kJ/mol en 1, mientras que en 2 estos valores son de 0,25 kJ/mol (F1...F2), 8,37 kJ/mol (O2...H2) y resulta despreciable para el contacto O1...F1.

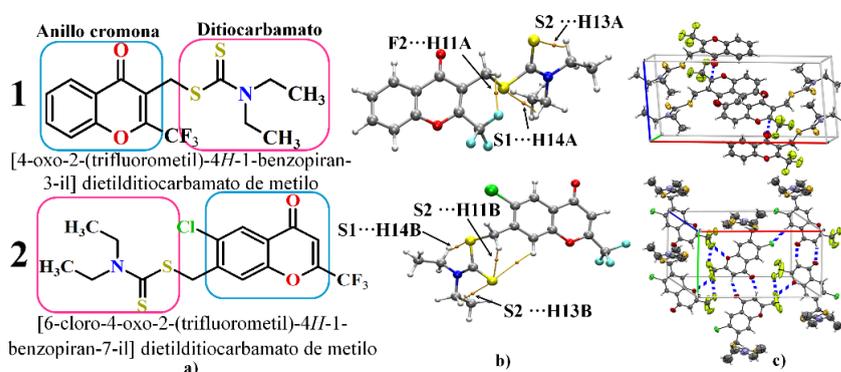


Figura 1. a) Estructura, b) Interacciones intramoleculares y c) Empaquetamiento cristalino de los compuestos estudiados 1 y 2.

[1] J. Reis, A. Gaspar, N. Milhazes, F. Borges, J. Med. Chem. 60 (2017) 7941-7957.

[2] T. Tella, C.H. Pohl, A. Ayangbenro, F1000Research 11 (2022) 243.

[3] W. Huang, Y. Ding, Y. Miao, M.Z. Liu, Y. Li, G.F. Yang, Eur. J. Med. Chem. 44 (2009) 3687-3696.

[4] A. Angeloski, J.M. Hook, M. Bhadbhade, A.T. Baker, A.M. McDonagh, Cryst. Eng. Comm. 18 (2016) 7070-7077.



INTERDIFUSIÓN EN CERÁMICAS MAGNETOELÉCTRICAS DE COMPOSICIÓN



E. Nishi¹, M. Castro¹, J. Camargo^{1*}

¹Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, INTEMA, Av. Colón 10850, 7600, Mar del Plata
*jcamargo@fi.mdp.edu.ar

Palabras claves: COMPUESTOS CERÁMICOS; MAGNÉTICO; PIEZOELÉCTRICO; DIFUSIÓN

Los materiales magnetoeléctricos presentan un acoplamiento entre propiedades magnéticas y eléctricas. Sin embargo, este comportamiento tiende a ser débil a temperatura ambiente en los materiales magnetoeléctricos monofásicos comúnmente estudiados [1]. Para abordar esta limitación, los materiales compuestos que incluyen tanto un material piezoeléctrico como uno magnético ofrecen una solución prometedora [2-3]. Por ello, este trabajo se centra en la síntesis y optimización de las propiedades magnetoeléctricas de cerámicas combinando fases magnéticas y piezoeléctricas con la composición $60(\text{Ba}_{0,85}\text{Ca}_{0,15})(\text{Zr}_{0,1}\text{Ti}_{0,9})\text{O}_3\text{-}40\text{Ni}_{0,6}\text{Zn}_{0,4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (BZCT-NZF).

Para obtener la fase ferrita NZF, se activaron mecánicamente acetato de zinc, acetato de níquel y hematita en un medio alcohólico durante 3 horas utilizando un molino planetario. El polvo resultante se calcinó a 1050 °C durante 2 horas. Para la fase piezoeléctrica BZCT, se activaron mecánicamente óxido de titanio, óxido de zirconio, carbonato de calcio y carbonato de bario durante 3 horas en un molino planetario. El polvo resultante se trató térmicamente a 1250 °C durante 4 horas. Ambos polvos calcinados se mezclaron, según la proporción en peso 60BZCT-40NZF, en un molino planetario durante 1,5 horas. La mezcla se prensó uniaxialmente en discos y se sinterizó a 1200 °C durante 2, 4, 6 u 8 horas. Las muestras obtenidas se analizaron mediante Difracción de Rayos X (DRX) y Microscopía Electrónica de Barrido (MEB). Además, la densidad de las muestras se midió mediante el método de Arquímedes. Para las propiedades funcionales, se pintaron electrodos de plata en las caras plano-paralelas y se midieron las propiedades dieléctricas a temperaturas que variaron entre 25 y 500 °C. Finalmente, se determinaron la histéresis magnética y el coeficiente magnetoeléctrico de las muestras sinterizadas.

A partir de este estudio, se determinó que, a medida que se incrementa el tiempo de sinterización, la densidad de las muestras disminuye. Además, los estudios de DRX mostraron que en todos los tiempos de síntesis se obtuvieron las estructuras perovskita y espinela, correspondientes a las fases BNKT y NZF. También se observa que los tiempos de sinterización más largos favorecen la interdifusión de elementos entre ambas fases, lo cual se aprecia en la figura 1, con el desplazamiento a menores ángulos de los picos de 39° y 45,5° a medida que aumenta el tiempo de sinterizado. Complementariamente, mediante EDS se observa la difusión de elementos entre las fases.

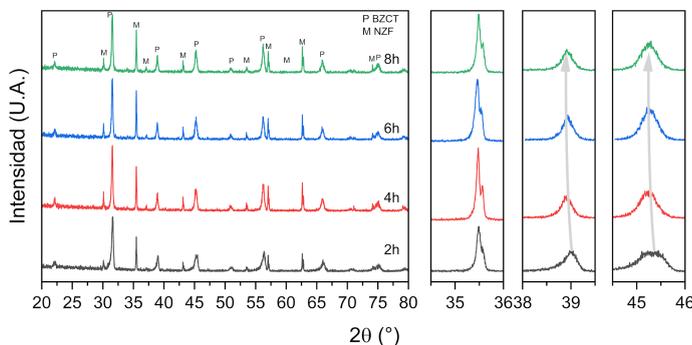


Figura 1. Difractogramas de rayos X de las muestras 60BZCT-40NZF sinterizadas entre 2 y 8 horas.

- [1] V. A. Murashov et al., *Ferroelectrics* 162 (1994) 11-21.
[2] J. Van Den Boomgaard et al., *J. Mater. Sci.* 9 (1974) 1705-1709.
[3] C.-W. Nan et al., *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002) 3831-3833.



**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ESPINELAS MIXTAS $\text{LiMn}_{1.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$
PARA CÁTODOS EN CELDAS DE ION LITIO**

D.L. Nossa González^{1*}, N. Martiarena¹, M.P. Quiroga Argañaraz¹, K. Jori¹, D. Richard², L.J. Giovanetti¹,
M.G. Ortiz¹, J. Ramallo López¹, F.G. Requejo¹, Y.B. Bava¹.

¹INIFTA, UNLP-CONICET, Diagonal 113 y 64, CP 1900, La Plata

²CETMIC, UNLP-CIC, Camino Parque Centenario 2499-2599, M. B. Gonnet, Buenos Aires

* dlissethn@gmail.com

Palabras claves: LITIO; LMNO; SÍNTESIS; DRX; ENERGÍA

Las baterías de ion litio (LIB) son reconocidas como uno de los sistemas de almacenamiento de energía más adecuados y auspiciosos, actualmente en investigación y desarrollo. Sin embargo, las actuales LIBs no satisfacen completamente los requisitos de rendimiento, estabilidad y seguridad para un uso generalizado. Estas limitaciones son atribuidas en gran medida al material catódico, que determina el rendimiento general de la celda. [1-3].

Una de las estrategias para atender dichas demandas consiste en explorar, entre otros aspectos, los materiales de los electrodos con mejor rendimiento electroquímico y estabilidad. En este trabajo se sintetizaron óxidos con estructuras de tipo espinela $\text{LiMn}_{1.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$ (LMNO) en estado sólido y por el método sol-gel. En una primera instancia se realizaron las síntesis partiendo de los respectivos carbonatos metálicos y luego se probó la variación del reactivo de carbonato de manganeso por dióxido de manganeso. Los materiales catódicos preparados se caracterizaron por difracción de rayos X (DRX), espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), espectroscopía de fluorescencia de rayos X (XRF) y espectroscopia de absorción de rayos X en el borde cercano del Mn y Ni (XANES). Por último, se realizó la caracterización electroquímica por voltamperometría cíclica y una primera etapa de ciclados galvanostáticos.

Los materiales LMNO preparados por ambos métodos de síntesis presentaron rendimientos de la reacción de alrededor del 90%. Los difractogramas de los materiales sinterizados muestran los picos característicos de LMNO y la ausencia de picos a $2\theta = 24^\circ, 35^\circ, 40^\circ, 46^\circ, 47^\circ, 57^\circ$ y 75° permite inferir que los materiales adoptan una estructura o red desordenada Fd-3m.[4] Del análisis de los espectros FTIR se identificaron las bandas vibracionales e intensidades correspondientes a la espinela $\text{LiMn}_{1.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$ con una estructura de tipo desordenada, concordando y soportando los resultados encontrados por DXR de polvo.[5]

Con los materiales sintetizados se prepararon pinturas del material catódico sobre aluminio, a partir de pinturas en difluoruro de polivinilo con un 80% del material activo LMNO y 10 % de carbón super P. Para la evaluación electroquímica de estos materiales se ensamblaron celdas en una caja de guantes de atmósfera controlada, empleando Litio metálico como contraelectrodo y electrodo de referencia y utilizando como electrolito LiPF_6 (1M). Se realizó sobre cada material una voltamperometría cíclica entre 2,5 y 5,2 V a una velocidad de barrido de $0,1\text{mV s}^{-1}$, y luego ciclados galvanostáticos de carga y descarga con una corriente continua de $C/2$ ($1C = 146\text{ mA g}^{-1}$). Con el análisis de los espectros de FTIR y XANES, se pudo confirmar la incorporación de Ni en la espinela; mientras que, la estimación de la relación Mn/Ni electroactivo fue obtenida de los voltamperogramas. Los materiales que mejor capacidad electroquímica han presentados son los obtenidos a partir de carbonatos, con una capacidad electroquímica entre 60 y 80 mAhg^{-1} . La diferencia en la capacidad electroquímica de los diferentes materiales puede asociarse a cambios en la morfología de las partículas y a posibles impurezas de algunos óxidos que se pueden formar durante la reacción.

[1] D. Larcher and J. M. Tarascon, Nature Chemistry, 7(1) (2014) 19-29.

[2] L. Matthew, J. Lu, Z. Chen, K. Amine, Advanced Materials 30 (2018) 1800561.

[3] W. Lee, S. Muhammad, C. Sergey, H. Lee, J. Yoon, Y.M. Kang, W.S. Yoon, Angew. Chem. Int. Ed., 59 (2020) 2578-2605.

[4] M. Agostini, A. Matic, S. Panero, F. Croce, R. Gunnella, P. Reale, S. Brutti. Electrochim. Acta 235 (2017) 262-269.

[5] L. Wang et al., Solid State Ion. 193 (2011) 32-38.



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



ESTUDIO DE LA MORFOLOGÍA Y COMPOSICIÓN SUPERFICIAL DE EPITAXIAS DE HgCdTe (MCT)

J.L.M. Núñez García^{1,2*}, E.A. Heredia¹, D.G. Franco³, U.E. Gilibert^{2,4}

¹UNIDEF, MINDEF, CONICET - DECAPE, Juan B. de La Salle 4397 (CP 1603), Villa Martelli, Pcia. de Buenos Aires

²Centro de Tecnologías Químicas (CTQ), Departamento de Ingeniería Química, UTN - FRBA, Medrano 951 (CP 1179), CABA

³Laboratorio de Haces de Neutrones (LAHN), CNEA-CAB Av. Bustillo Km. 9,5 (CP R8402AGP), San Carlos de Bariloche, Pcia. de Río Negro

⁴SEGEMAR, INTI, Av. General Paz 5445 (colectora) (CP B1650WAB), San Martín, Pcia. de Buenos Aires

*jnunez@citedef.gob.ar

Palabras claves: HgCdTe; SEM; EDS; IR.

El MCT es un semiconductor ampliamente reconocido por su versatilidad en aplicaciones de detección infrarroja. La capacidad de ajustar su banda prohibida mediante la variación de las proporciones de mercurio y cadmio lo posiciona como un material estratégico en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos para diversas industrias, desde la defensa y la seguridad hasta la ciencia y la exploración espacial. La obtención de epitaxias de MCT implica diversos tipos de técnicas de crecimiento desde complejas y costosas debido a las condiciones de trabajo necesarias y la alta pureza de los materiales a utilizar como epitaxia por haces moleculares (MBE) y el crecimiento epitaxial por fase líquida (LPE), o más económicas como la epitaxia de fase vapor (VPE) [1, 2]. Este último es el caso utilizado en nuestro laboratorio en la obtención del MCT, a partir de sustratos de CdTe y CdZnTe.

Se caracterizó la superficie de las muestras por medio de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), y por Espectroscopía de Rayos X de energía dispersiva (EDS). El SEM permitió obtener imágenes de alta resolución de la superficie, revelando una morfología cada una de las muestras. Por su parte, el EDS proporcionó información cuantitativa sobre la composición elemental, confirmando la presencia de Hg, Cd y Te. Sin embargo, se identificaron variaciones en la composición y la presencia de defectos superficiales [3] atribuidos a problemas en las condiciones de operación durante el crecimiento.

[1] G. Cohen-Solal, Y. Marfaing, F. Bailly, Rev. Physics Appl. 1 (1966) 11-17.

[2] U. E. Gilibert, Tesis Doctoral de la Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, CABA (2007).

[3] M.H. Aguirre, Tesis Doctoral de la Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Física, CABA (2001).



**POTENCIAL INHIBIDOR DE INTEGRASA DE VIH:
CARACTERÍSTICAS ESTRUCTURALES DEL ÁCIDO 3-HIDROXIQUINURÉNICO
COMO LIGANDO LIBRE Y SU COORDINACIÓN CON Mn(II)**

G.A. Oppezzo^{1*}, F. Di Salvo², M.M. Blanco¹, M.S. Shmidt¹

¹Cátedra de Química Orgánica I e Instituto de Tecnología Farmacéutica y Biofarmacia (InTecFyB), Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires (C1113AAD), CABA

²Dto. de Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física (DQIAQ) e Instituto de Química, Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE, CONICET-UBA), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (C1428EHA), CABA

*guido.oppezzo@gmail.com

Palabras claves: 4-QUINOLONAS; COMPUESTOS DE COORDINACIÓN; INHIBIDORES DE INTEGRASA DE VIH

El Elvitegravir es un fármaco actualmente en uso con actividad inhibidora de Integrasa de VIH. Los requerimientos farmacofóricos de la enzima incluyen una tríada quelante que forma un compuesto de coordinación con dos iones Mg(II) dentro de un bolsillo hidrofílico en el sitio activo, entre otros requisitos estructurales. Por analogía con la estructura del fármaco y por carecer de efectos citotóxicos [1], llevamos a cabo la síntesis de derivados del ácido 3-hidroxiquinurénico (3-HOKA) y compuestos de coordinación con metales divalentes como el Mg(II) y el Mn(II), para evaluar su potencial como ligando en busca de nuevos fármacos antirretrovirales.

La síntesis se llevó a cabo por tratamiento del 3-HOKA con $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ en medio acuoso básico a TA. Mediante la evaporación lenta del solvente de soluciones acuosas básicas del compuesto de coordinación se obtuvieron monocristales aptos para llevar a cabo estudios de difracción de rayos X.

La estructura cristalina del compuesto de coordinación está formada por dos moléculas de 3-HOKA unidas al metal a través del grupo carboxilo. Cuatro moléculas de agua ocupan los restantes sitios de coordinación (Fig. 1a).

El 3-HOKA presenta una estructura de lactama viniloga cuando forma parte del compuesto de coordinación con Mn(II). En cambio, en su forma libre esta especie cristaliza como monohidrato de la forma zwitteriónica, donde una molécula de agua establece un enlace de hidrógeno con el hidroxilo en posición 4 y contribuye a la estabilización del tautómero [2]. Adicionalmente se observa un enlace de hidrógeno entre el 3-OH y el 2-CO. Este comportamiento zwitteriónico es similar al observado para el derivado 6-metoxilado del 3-HOKA en estado sólido cristalino (Fig. 1b).

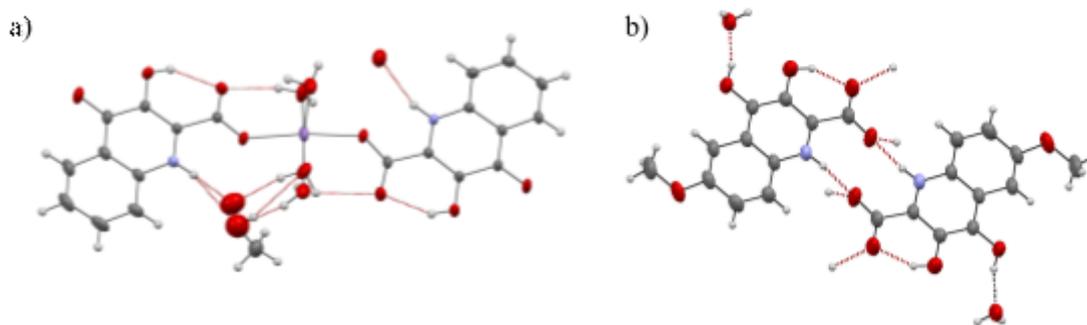


Figura 1: a) Complejo 3-HOKA/Mn(II). b) 6-OCH₃-3-HOKA

[1] M.S. Shmidt, M.C. García Vior, S.D. Ezquerria Riega, J.M. Lázaro-Martínez, M.I. Abasolo, A. Lázaro-Carrillo, A. Tabero, A. Villanueva, A.B. Moglioni, M.M. Blanco, J.C. Stockert Dyes and Pigm. 162 (2019) 552-561.

[2] M.S. Shmidt, M.F. Martini, G.A. Oppezzo, J.M. Lázaro Martínez, F. Di Salvo, L. Fabian, A.G. Moglioni, M.M. Blanco. J. Mol. Struct. 1308 (2024) 138077.



EFFECTO DEL TRATAMIENTO HIDROTHERMAL EN LA COMPOSICIÓN, PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MORFOLÓGICAS DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA

D.F. Ordóñez Obando¹, P.C. Rivas Rojas^{2,3,*}, L.G. Pampillo⁴, L. Troncoso Aguilera³, J. Lisoni⁵, C.L. Londoño Calderón^{1,6}

¹Centro de Desarrollo Tecnológico (CDT) INNVESTIGA, Universidad Autónoma de Manizales, Manizales - Colombia

²Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, Escuela de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Buenos Aires

³Instituto de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Austral de Chile, Valdivia, Chile

⁴Laboratorio de Sólidos Amorfos, Facultad de Ingeniería, INTECIN, UBA-CONICET, Ciudad de Buenos Aires

⁵Unidad de Microscopía Electrónica - Core Facility, Instituto de Ciencias Físicas y Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad Austral de Chile, Valdivia, Chile

⁶Grupo de Investigación en Física y Matemáticas con Énfasis en la Formación de Ingenieros, Universidad Autónoma de Manizales, Manizales - Colombia

*privasr@unsam.edu.ar

Palabras claves: MAGNETITA; NANOPARTÍCULAS; ÓXIDOS DE HIERRO; HIDROTHERMAL.

La magnetita estequiométrica (Fe_3O_4) contiene un átomo de hierro divalente, mientras que los otros dos son trivalentes. Este compuesto tiene una estructura de espinela inversa cúbica centrada en las caras y pertenece al grupo espacial $\text{Fd}\bar{3}m$. Los iones ferrosos (Fe^{2+}) ocupan la mitad de los sitios octaédricos, mientras que los iones férricos (Fe^{3+}) están situados de manera uniforme tanto en los sitios octaédricos como en los tetraédricos. Mientras que la magnetita es una mezcla de átomos de hierro que tienen diferentes valores de valencia, la maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) y la hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) son óxidos de hierro trivalentes. La oxidación de magnetita produce maghemita y/o hematita dependiendo de las condiciones de oxidación, la ruta química aceptada es [1]



En este trabajo se estudia el efecto de la oxidación de nanopartículas de magnetita obtenidas por coprecipitación química y sometidas a un proceso de autoclave a 100°C durante 24 h. Los resultados de DRX dan cuenta de la aparición de goetita ($\alpha\text{-FeOOH}$) y hematita luego del proceso hidrotermal (Fig. 1). Adicionalmente, las imágenes obtenidas por SEM muestran un cambio de la morfología de esferas y octaedros (antes) a esferas y barras (después). La presencia de dichas fases cambia significativamente los modos vibracionales del material (FT-IR), la estabilidad de las partículas en dispersión acuosa (Potencial-Z) y el radio hidrodinámico (DLS). Los resultados sugieren que, durante el tratamiento hidrotermal, hay un proceso de disolución y recristalización del material que favorece los cambios de fase y morfológicos observados.

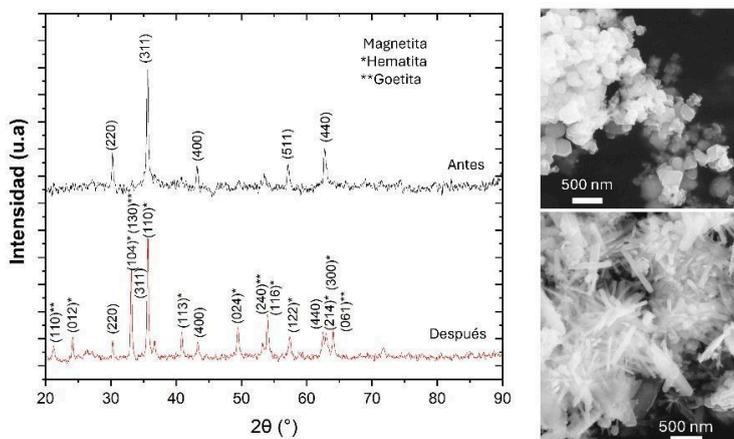


Figura 1. Difractograma XRD y Microscopía SEM de las nanopartículas antes y después del proceso hidrotermal.

[1] Z. Li, C. Chanéac, G. Berger, S. Delaunay, A. Graff, and G. Lefèvre, RSC Adv. 9 (2019) 33633-33642.



PERSPECTIVAS SOBRE LA FORMACIÓN Y ESTRUCTURA DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA NO ESTEQUIOMÉTRICA

J.M. Orozco-Henao^{1*}, F.L. Ali¹, G.A. Pasquevich², P. Mendoza Zélis², C. Koch³, C. Vericat¹, M.H. Fonticelli¹, G.C. Lavorato¹

¹Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Universidad Nacional de La Plata- CONICET, Diagonal 113 y 64 S/N, 1900 La Plata, Buenos Aires

²Instituto de Física La Plata (IFLP-CONICET), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata

³Departamento de Física, Universidad Humboldt de Berlín, Berlín, Alemania

*juanoroh@inifta.unlp.edu.ar

Palabras claves: MAGNETITA; NANOPARTÍCULAS; ESTEQUIOMETRÍA

Las nanopartículas (NPs) de magnetita (Fe_3O_4) se utilizan hoy en día de manera extensiva en aplicaciones biomédicas, medioambientales y catalíticas. Se sabe que la magnetita se oxida a maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$), lo que provoca cambios en las propiedades físicas de las NPs [1]. Para una aplicación efectiva de las NPs de óxido de hierro, es esencial lograr un control cuidadoso del grado de oxidación resultante de los pasos de síntesis y post-funcionalización. Entre una amplia variedad de materiales nanoestructurados, la magnetita es probablemente el ejemplo más representativo de la importancia del control del grado de oxidación, ya que la oxidación de Fe_3O_4 a $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ conduce a una disminución sustancial de la conductividad y a una reducción en la anisotropía magnetocristalina y el momento magnético.

Se presentan resultados acerca del estudio de la estequiometría y su relación con las propiedades estructurales de NPs de magnetita/maghemita obtenidas por síntesis de descomposición térmica de acetilacetato de hierro (III). Las nanopartículas obtenidas comprenden tamaños entre 9-28 nm. Medidas de espectroscopía de efecto Mössbauer [2] permitieron determinar la relación del contenido magnetita/maghemita con el tamaño (Figura 1a). Sin embargo, en contraste con algunos reportes en la literatura para sistemas de NPs similares, medidas de espectroscopía de pérdida de energía de electrones revelaron que la concentración de Fe^{2+} es homogénea a lo largo de los nanocristales no estequiométricos (Figura 1b-d). Es decir, no encontramos evidencia de una estructura híbrida tipo core/shell con una capa externa de $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ en congruencia con lo reportado por Andersen et al. [3].

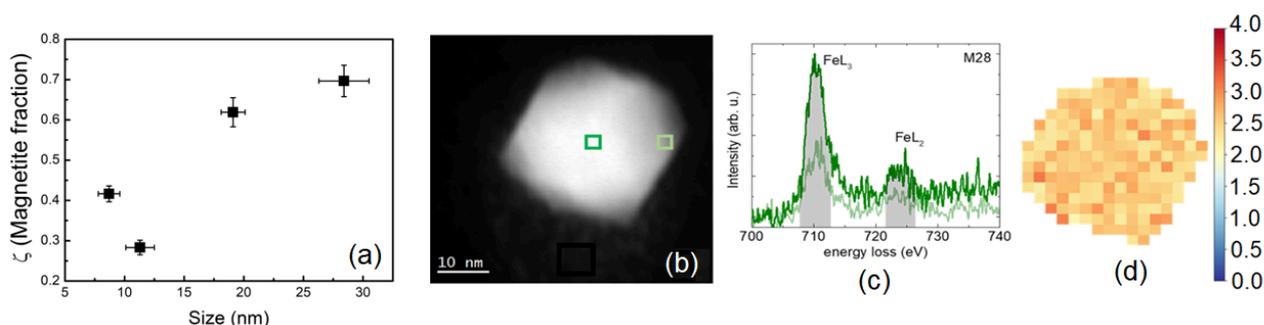


Figura 1. (a) Contenido de magnetita en función del tamaño medio de nanopartícula. (b) imágenes HAADF-STEM. (c) Espectros de pérdida de energía de electrones de distintas regiones. (d) Mapas de la relación FeL_3/L_2 calculados integrando la señal en las regiones sombreadas para nanopartículas de 28 nm.

[1] G.C. Lavorato, A.A. de Almeida, C. Vericat, M.H. Fonticelli, Nanotechnology. 34(19) (2023) 192001.

[2] J. Fock et al., J. Phys. D. Appl. Phys. 50 (2017) 265005.

[3] H. L. Andersen et al., IUCrJ 8 (2021) 33-35.



FABRICACIÓN DE LÁMINAS DELGADAS DE ZIRCONATO DE LITIO DOPADO CON TITANIO (Ti-Li₂ZrO₃) POR TAPE CASTING CON APLICACIÓN COMO ELECTROLITO SÓLIDO

N.G. Orsetti^{1,2*}, D.M. Pérez Coll³, R. Moreno³, G. Lorenzo^{4,5}, G. Suárez^{1,2}

¹Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC), M. B. Gonet, Buenos Aires

²Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, La Plata, Buenos Aires

³Instituto de Cerámica y Vidrio (ICV), CSIC, Madrid, España

⁴Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos (CIDCA), La Plata, Buenos Aires

⁵Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, Buenos Aires

*norsetti@cetmic.unlp.edu.ar / norsetti@quimica.unlp.edu.ar

Palabras claves: ZIRCONATO DE LITIO; DOPADO; DRX; SEM; EIS

El zirconato de litio (Li₂ZrO₃ o LZO) ha ganado interés en el desarrollo de tecnologías energéticas renovables y eficientes, entre ellas las baterías de Li de estado sólido [1]. En este trabajo se desarrolló una vía de procesamiento coloidal para sintetizar LZO dopado con 5% molar de Ti (LZTO) y conformarlo como electrolito sólido delgado por la técnica de colado en cintas (*tape casting*). El Ti fue elegido como dopante para mejorar la sinterabilidad del LZO y lograr materiales densos a menores temperaturas, atenuando así la evaporación de Li a altas temperaturas.

La síntesis de LZTO se llevó a cabo a partir de Li₂CO₃, una suspensión comercial de nano-ZrO₂ (*Luxfer Mel Tech*) y nano-TiO₂, teniendo en cuenta trabajos previos [2]. El Li₂CO₃ se molió por atricción en isopropanol, se secó y finalmente se tamizó para lograr un polvo pasante malla 230 (<63 μm). Luego, en agua destilada en agitación se añadieron los polvos de nano-TiO₂ y Li₂CO₃, en cantidades estequiométricas (relación molar Li₂CO₃-ZrO₂-TiO₂ de 1,05:0,95:0,05), y después se agregó la nano-ZrO₂ coloidal. Este orden de adición fue requerido para evitar su desestabilización. Seguidamente, la mezcla se congeló en N₂ líquido y se liofilizó (-50°C y 0,5 mBar). El sólido obtenido se tamizó y calcinó en dos etapas (800°C/3h + 900°C/3h), y su pureza y cristalinidad se analizaron por difracción de rayos X (DRX) de polvo. Para finalmente conformar cintas, se prepararon suspensiones acuosas con 65% p/p de LZTO, usando poliacrilato de NH₄⁺ (*Duramax D3005*) como dispersante y homogenizándolas en un molino de bolas. Luego, se adicionó binder acrílico (*Duramax B1000*) en la suspensión y se conformaron cintas por colado sobre Mylar®, soportado en una máquina de cuchilla simple [3]. Una vez secas, las cintas se sinterizaron a 1150 °C/15h. La densidad de las láminas resultantes se determinó por el método de Arquímedes, se analizó la composición de fases por DRX, se caracterizó la microestructura por microscopía electrónica de barrido (SEM) y se evaluó la conductividad iónica (σ) vs. temperatura por espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

Tras la sinterización, las láminas de LZTO contrajeron 32-35,6% superficialmente y densificaron al 85,5% vs. la densidad teórica del material, en comparación al 69,2% del LZO no dopado. El análisis por DRX de las láminas determinó LZO monoclinico y 4,1% de impurezas de ZrO₂, pero no se observó la segregación de TiO₂. Los picos en el difractograma del LZTO se desplazaron hacia mayores ángulos respecto al LZO sin dopar, y el análisis de Rietveld determinó 1% de reducción volumétrica en la celda debido al reemplazo de Zr⁴⁺ por Ti⁴⁺, revelando la formación de una solución sólida (Li₂Zr_{1-x}Ti_xO₃). Las imágenes SEM mostraron crecimiento de grano apreciable en el LZTO, con una microestructura formada por granos de 6,4 μm de tamaño medio, en comparación a los 4,5 μm para el LZO sin dopar. A su vez, las láminas presentaron espesores de 450 μm. Por último, se midieron valores de σ del orden de 10⁻⁷-10⁻⁵ S.cm⁻¹ entre los 300-600 °C, acorde con la bibliografía [1]. En resumen, se fabricaron electrolitos sólidos densos de LZTO mediante el procedimiento coloidal descrito y se prevé que sus propiedades eléctricas aún son potencialmente mejorables mediante la incorporación de otros co-dopantes aliovalentes al Zr⁴⁺.

[1] N.G. Orsetti, M. Gamba, S. Gómez, J.P. Yasnó, G. Suárez, *Ceram. Int.* 48 (2022) 8930-8959.

[2] N.G. Orsetti, J.P. Yasnó, M. Gamba, G. Lorenzo, G. Suárez, *Ceram. Int.* 49, 6 (2023) 8827-8838.

[3] N.G. Orsetti, E. Rosado, A. Alonso, G. Lorenzo, R. Moreno, G. Suárez, *J. Eur. Ceram. Soc.* 43 (2023) 6956-6966.



**CARACTERIZACIÓN CRISTALOGRÁFICA DE CUARZO DEL COMPLEJO ÍGNEO
SIERRA NORTE EN EL VALLE DE ONGAMIRA
(DPTOS ISCHILIN Y TOTORAL, CÓRDOBA, ARGENTINA)**

I. Perassi^{1*}, J. Nóbile¹, G. Collo¹, C. Wunderlin², J. Caminoa³, C. Brizuela³, A. Robledo³, P. Weihmuller³, J. Mignino³, C. Romanutti³, A. Germanier⁴, S. Faudone⁴, A. Izeta³, R. Cattaneo³

¹Centro de investigaciones en Ciencias de la Tierra, CONICET - UNC

²Centro Regional de Investigaciones Científicas y Transferencia Tecnológica de La Rioja (CONICET-UNCA-SEGEMAR-UNLaR)

³IDACOR-CONICET, Museo de Antropología, UNC

⁴Unidad de estudios físicos. CEPROCOR – Ministerio de Producción, Ciencia e Innovación Tecnológica de Córdoba

*ileana.perassi@gmail.com

Palabras claves: ARTEFACTOS LÍTICOS; CUARZO; CRISTALOGRAFÍA; ONGAMIRA

En el marco de un proyecto interdisciplinario (geológico, físico, químico y arqueológico) se caracterizaron química, composicional y texturalmente diversos afloramientos de cuarzos en pegmatitas que presentan interés para estudios arqueológicos en la región donde se emplaza el valle de Ongamira. Las muestras proceden de 18 afloramientos identificados en el Complejo Ígneo Sierra Norte en los sectores suroeste y noroeste del valle y de dos sitios arqueológicos residenciales a donde se transportó este mineral para ser tallado[1]. La caracterización se realizó mediante análisis petrográfico en corte delgado, FRX y DRX de polvos. Al complementar la información de las diversas técnicas, se confirmó que la fase principal de las muestras es cuarzo alfa, presentando en algunos casos inclusiones de otras fases minerales en cantidades trazas [1].

Para lograr una caracterización más detallada de la estructura cristalina, se realizó el refinamiento de los patrones de difracción mediante el método Rietveld, utilizando un modelo de cuarzo con sistema trigonal (grupo espacial P 32 2 1). En esta contribución se observan variaciones en los parámetros de red de la celda de las fases de cuarzo. Las variaciones más significativas entre las muestras se presentan en los parámetros de red a y b sin seguir una tendencia que esté relacionada con la geoquímica. En contraste, el parámetro c de la celda presenta un comportamiento menos variable y los valores son similares, con excepción de las muestras que evidencian un aumento significativo de este parámetro. En el análisis petrográfico, estas muestras presentaban, comparativamente, cristales de menor tamaño, con una elongación no muy marcada, extinción ondulosa y límites difusos que se interpretaron como procesos de deformación dúctil. Estas observaciones plantean la posibilidad de la cristalografía del cuarzo a lo largo del eje c se asocia a procesos de deformación a los que estuvo expuesto[3].

La aplicación de diferentes técnicas analíticas, junto con la producción de información geológica del área de estudio, presenta un importante potencial para caracterizar los afloramientos de este mineral, interpretar su génesis y los procesos geológicos que lo afectaron a lo largo de su historia. Esta información, a la vez, puede aplicarse en la distinción de la procedencia de cuarzos que fueron utilizados por poblaciones prehispanicas en la elaboración de artefactos líticos recuperados en sitios arqueológicos de la región.

[1] J. Caminoa. Tecnología lítica y paisaje durante el Holoceno desde Ongamira (Deptos. Ischilín y Totoral. Córdoba. Argentina). Tesis doctoral. Facultad de Filosofía y Humanidades. Universidad Nacional de Córdoba. Córdoba 2023.

[2] R.A Young, The Rietveld Method. IUCr, Oxford University Press, 298p. New York 1993.

[3] L. Menegon, G.Pennacchioni, R. Heilbronner, L. Pittarello, J. Struct. Geol. 30 (2008) 1332-1347.



**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN MEDIANTE DRX, FESEM Y GISAXS DE
PELÍCULAS DELGADAS DE SnO₂ DOPADO CON CuO
PARA SENSORES DE H₂S (g) DE ALTA SENSIBILIDAD**

M.P. Poiasina^{1*}, L.M. Acuña¹, E.A. Heredia¹, C.D. Bojorge¹

¹UNIDEF (MINDEF-CONICET), Departamento de Materiales y Procesos Estratégicos (DEMAPE), J. B. de La Salle 4397, 1603 Villa Martelli, Pcia. de Bs. As.

*mppoiasina@gmail.com

Palabras claves: PELÍCULAS DELGADAS; SOL GEL; DIP-COATING; SPRAY-PYROLYSIS; SnO₂

El dióxido de estaño (SnO₂) es un semiconductor con una estructura cristalina de rutilo tetragonal. Este material cerámico tiene la propiedad de cambiar su resistividad eléctrica cuando se lo expone a gases tóxicos y/o explosivos específicos, como el H₂, H₂S, CO, o compuestos orgánicos volátiles (VOCs), entre otros. Esta característica lo convierte en un material adecuado para la fabricación de sensores altamente sensibles, capaces de detectar concentraciones de estos gases en niveles de partes por millón (ppm). Algunas de las características que determinan la capacidad del SnO₂ como sensor son su cristalinidad y microestructura. La literatura revisada destaca avances significativos en la sensibilidad y estabilidad de este material a través del uso de dopantes [1] y la utilización de nanomateriales [2], entre otros.

La motivación de este estudio es construir un sensor de alta sensibilidad que detecte de (10-15) ppm de un gas sumamente tóxico como es el H₂S (g) en aire. Según la bibliografía, el dopado con CuO en un 5% en peso resulta altamente sensible y selectivo para dicho gas [3].

En este trabajo se presentan los resultados de la caracterización estructural de dos películas delgadas de SnO₂ dopado con CuO (5% en peso) sintetizadas por sol-gel y depositadas mediante dos métodos diferentes: dip-coating y ultrasonic spray pyrolysis.

Las películas fueron estudiadas mediante difracción de rayos X (DRX) para analizar sus propiedades estructurales y el tamaño medio de cristalita, microscopía electrónica de barrido (FESEM) para analizar características superficiales, y dispersión de rayos X de bajo ángulo con incidencia rasante (GISAXS) para la determinación de la porosidad y el radio promedio de poro.

Se analiza la influencia de la forma de deposición en las propiedades estructurales de las películas obtenidas.

Este material será utilizado para el desarrollo de un sensor altamente sensible para el gas sulfhídrico (H₂S), por lo que este estudio proporciona información útil para mejorar la performance de los dispositivos.

[1] J. Sukunta, A. Wisitsoraat, A. Tuantranont, S. Phanichphant, C. Liewhiran, Sens. Actuators B Chem. 242 (2017) 1095-1107.

[2] N. Yamazoe, Sens. Actuators B 5 (1991) 7-19.

[3] A. Ayesh, A. Alyafei, R. Anjum, R. Mohamed, M. Buharb, B. Salah, M. El Muraikhi, Appl. Phys. A 125 (2019) 550.



**TRANSFORMACIÓN ESTRUCTURAL DE LA FASE RUDDLESDEN-POPPER $\text{LaSr}_3\text{Fe}_{3-x}\text{Ga}_x\text{O}_{10-\delta}$
Y SUS PROPIEDADES ELECTROQUÍMICAS**

M.C. Quintero Gómez^{1*}, M.E. Aristizábal¹, F. Prado¹

¹Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur e IFISUR, Bahía Blanca, Buenos Aires

*Mariaclara3010@gmail.com

Palabras claves: RUDDLESDEN-POPPER; DRX; CONDUCTIVIDAD MIXTA; SOFC; CÁTODO

Las fases de Ruddlesden-Popper (R-P) de fórmula $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$ con A = tierra rara o alcalina, B = metal de transición y $n = 1, 2$ o 3 han sido estudiadas en los últimos años debido a sus propiedades de conductividad mixta [1]. Estas fases tienen potencial para ser utilizadas en aplicaciones electroquímicas de alta temperatura como las membranas de separación de oxígeno [2], cátodo de celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) [1,3] o water splitting [4]. El compuesto $\text{LaSr}_3\text{Fe}_3\text{O}_{10}$ es un conductor mixto con estructura tetragonal que exhibe no-estequiometría de oxígeno $\delta \sim 0.3$ en aire; la adición de metales con valencia fija, es una de las estrategias usadas para incrementar las vacancias de oxígeno en la estructura y mejorar así la conducción iónica. En este trabajo se prepararon muestras del sistema $\text{LaSr}_3\text{Fe}_{3-x}\text{Ga}_x\text{O}_{10-\delta}$ con $0.0 \leq x \leq 1.2$. La síntesis de los diferentes materiales se llevó a cabo mediante el método de reacción de estado sólido con una temperatura de síntesis entre 1300 y 1400°C durante 24 h en aire. Mediante el análisis de datos de difracción de Rayos-X utilizando el método Rietveld se determinó la estabilidad de la fase tetragonal en el rango $0.0 \leq x \leq 0.9$ y la transformación a la fase ortorrómbica que ocurre con la adición de Ga [5]. Los resultados obtenidos muestran la coexistencia de la fase de R-P con una pequeña fracción de fase perovskita $< 5\%$. La coexistencia de estas fases fue analizada mediante el uso de un microscopio electrónico de barrido de emisión de campo (FESEM) equipado con un detector EDS y microscopía Raman. En este trabajo se presentarán medidas de la conductividad eléctrica y expansión térmica en función de la temperatura, el contenido de Ga y la presión parcial de oxígeno. Finalmente, se evaluará el desempeño electroquímico del sistema $\text{LaSr}_3\text{Fe}_{3-x}\text{Ga}_x\text{O}_{10-\delta}$ con $0.0 \leq x \leq 1.2$ en celdas simétricas a través de medidas de espectroscopia de impedancia electroquímica. Se buscará correlacionar el comportamiento electroquímico con la composición química y las propiedades físicas de alta temperatura.

[1] X. Xu, Y. Pan, Y. Zhong, R. Ran and Z. Shao, Mater. Horiz. 7 (2020) 2519.

[2] T. Armstrong, F. Prado, and A. Manthiram, Solid State Ion. 140 (2001) 89.

[3] S. Chaianansutcharit, Y.W. Ju, S. Ida, and T. Ishihara, Electrochim. Acta 222 (2016) 1853.

[4] W. Zhu, J. Chen, D. Liu, G. Yang, W. Zhou, R. Ran, J. Yu, and Z. Shao. Mat, Chem. Front. 7 (2023) 4526.

[5] B. Shankar and H. Steinfink, J. Solid State Chem. 122 (1996) 390.



**PROPIEDADES FISICOQUIMICAS DE MEZCLAS INTERESTERIFICADAS DE GRASA
VACUNA Y ACEITE DE GIRASOL ALTO OLEICO**

M.R. Ramos Ramos^{1*}, V.A. García Londoño¹, R.J. Candal², M.L. Herrera¹

¹Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA-CONICET-UNSAM)

²Instituto de Investigación e Ingeniería ambiental (3iA – CONICET-UNSAM)

*mrramos@estudiantes.unsam.edu.ar

Palabras claves: METODOLOGÍA DE SUPERFICIE DE RESPUESTA; INTERESTERIFICACIÓN; CONDICIONES DE PROCESO; POLIMORFISMO

La legislación sobre grasas trans ha impulsado a la industria de alimentos a reformular sus productos y a eliminar las grasas trans, de origen industrial, de la dieta. La grasa vacuna (GV) presenta un alto contenido en ácidos grasos saturados y un problema de textura conocido como granulosis [1]. El aceite de girasol alto oleico (AGAO) presenta un gran valor nutricional por su alto contenido en ácido graso oleico; sin embargo, es un líquido a temperatura ambiente y no es adecuado para la formulación de productos que requieren sólidos de grasa para tener la textura adecuada como panificados aireados, margarinas y shortenings [2]. La interesterificación química (IEQ) permite modificar las propiedades fisicoquímicas y funcionales de las grasas originales. Con el objetivo de encontrar alternativas a las grasas trans que sirvan para la fabricación de alimentos más saludables se estudió la IEQ de mezclas de GV y AGAO. El Método de Superficie de Respuesta se empleó para encontrar las mejores condiciones de proceso para la IEQ. Las grasas puras (GV y AGAO), las mezclas físicas (47,6%AGAO/52,4%GV (Mezcla A) y 38%AGAO/62%GV (Mezcla B) y las mezclas interesterificadas (Mezclas A IE y B IE) se caracterizaron evaluando la composición en ácidos grasos y triacilglicéridos (TAGs), el contenido de grasa sólida, las propiedades térmicas, la microestructura, el polimorfismo y la reología por cromatografía gaseosa, cromatografía líquida de alta eficiencia, resonancia magnética nuclear, calorimetría diferencial de barrido y método del tubo capilar, microscopía de luz polarizada, difracción de rayos x (SAXS y WAXS) y ensayos oscilatorios, respectivamente. Los resultados mostraron que a partir de la reacción de interesterificación se obtuvieron cortes grasos más saludables que la grasa vacuna, libres de grasas *trans*, con menor contenido de ácidos grasos saturados y mayor contenido de ácidos grasos monoinsaturados y poliinsaturados. En ambos cortes grasos también se observó la disminución del contenido de los TAGs saturado-oleico-saturado permitiendo controlar el problema de granulosis presente en la grasa vacuna. Además, los cortes grasos mostraron una clara diferencia en las propiedades fisicoquímicas comparados con las mezclas sin interesterificar y con la grasa vacuna, mostrando un mejor perfil de contenido de grasa sólida en función de la temperatura que la grasa vacuna y puntos de fusión muy próximos a la temperatura corporal, lo que las hace más adecuadas para la formulación de productos grasos. Los estudios realizados por microscopía de luz polarizada, el análisis de las propiedades térmicas y del polimorfismo con la técnica de rayos x indicaron que las mezclas interesterificadas pueden cristalizar en la forma β' . La forma polimórfica β' crea una red cristalina capaz de incorporar grandes cantidades de aceite y de líquidos, lo cual conlleva a un producto suave y homogéneo. Dado que en la reacción de interesterificación se forman uniones químicas es esperable que no haya separación de fases (sólido-líquido) en los productos finales como es frecuente en el caso de mezclas físicas de materias grasas. El análisis del comportamiento reológico y polimórfico determinaron que la mezcla B IE resulta una grasa adecuada como base para shortenings para todo propósito y para margarina firme mientras que la mezcla A IE resultó adecuada para su aplicación como grasa para confitería y como base para margarina suave en pote, necesitando los productos fabricados con ésta última, control de la temperatura en la etapa de almacenamiento.

[1] Z. Meng, Y. Liu, L. Shan, Q. Jin, F. Wang, X. Wang, Food biophys. 6 (2011) 115-126.

[2] V. De Jesus, FDA Food Labeling Regulations for *trans*-Fat. In: *Trans-Fat Replacement Solutions*. D. R. Kodaly, Ed. AOCS Press, pp 61-70. Urbana, IL (2014).



**ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD DE LA INTERFASE DE Cu-Ta
EMPLEANDO MÉTODOS CLÁSICOS Y *AB-INITIO***

V.P. Ramunni^{1*}, J. Fernández^{2,3}, M.I. Pascuet^{1,2}

¹*Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA - CONICET, Nodo Constituyentes, Av. Gral. Paz 1499, B1650KNA San*

Martin, Prov. Buenos Aires

²*Comisión Nacional de Energía Atómica CNEA - Constituyentes, Av. Gral. Paz 1499, B1650KNA San Martin, Prov. Buenos Aires*

³*Universidad Nacional de General Sarmiento, Juan María Gutiérrez 1150, B1613 Los Polvorines, Provincia de Buenos Aires*

**vpram@cnea.gov.ar*

Palabras claves: INTERFASES; ALEACIÓN DE Cu-Ta; MIGRACIÓN; DIFUSIÓN

Las simulaciones atomísticas son capaces de proporcionar información sobre los mecanismos físicos responsables de la remarcada estabilidad estructural y la resistencia de las aleaciones inmiscibles de Cu-Ta. Para permitir simulaciones fiables de estas aleaciones, hemos desarrollado empleado un potencial, desarrollado por Forja y colaboradores [1], dependiente del ángulo (ADP) para el sistema Cu-Ta que ajusta a una gran base de datos de primeros principios y datos experimentales. Este potencial Cu-Ta se aplica para estudiar la cinética del crecimiento de grano en aleaciones nanocristalinas de Cu-Ta con diferentes composiciones químicas. Es sabido que los átomos de Ta forman cúmulos a escala nanométrica ubicados preferentemente en los límites de grano (GB) y las uniones triples [1] y que estos cúmulos fijan algunos de los GB en su lugar y causan una disminución drástica en el crecimiento de grano por el mecanismo de fijación Zener. Por lo tanto, en este trabajo presentamos

un estudio detallado de distintas interfaces de Cu-Ta. Proponemos entonces un modelo de la difusión en interfaces que constituye una variación respecto de otros disponibles en literatura [2]. También estudiamos la influencia del contenido de Ta sobre la estabilidad de la interfase. Emplearemos la teoría del estado de transición, provista de parámetros calculados con el código SADAS+MONÓMERO hecho en nuestro laboratorio empleando potenciales semiempíricos del tipo ADP para el sistema Cu-Ta [1] y los corroboramos parcialmente empleando el código VASP+DIMER. En particular, consideramos 2 interfaces con distintas orientaciones. Determinamos las energías de migración del Ta y el Cu a través de la interfase para cada estructura.

Encontramos que la concentración de Ta varía la energía de activación de forma no monótona en la lámina de Cu. Finalmente, observamos una la mayor difusividad del Cu hacia el Ta que viceversa. Los resultados de las simulaciones son muy consistentes con las observaciones experimentales y sugieren posibles mecanismos del efecto estabilizador de Ta.

[1] G.P. Purja Pun, K.A. Darling, L.J. Kecskes, Y. Mishin, Acta Mater. 100 (2015) 377-391.

[2] VP Ramunni, MI Pascuet, N Castin, A.M.F. Rivas, Comput. Mater. Sci. 188 (2021) 110146.



**ESTUDIO TEÓRICO NUMÉRICO DE LA DIFUSIÓN DE Sn EN HCP Zr
VÍA MECANISMO DE VACANCIAS**

V.P. Ramunni^{1,2*}, M.I. Pascuet^{1,2}, J. Fernández^{1,2,3}

¹Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA - CONICET, Nodo Constituyentes, Av. Gral. Paz 1499, B1650KNA San

Martin, Prov. Buenos Aires

²Comisión Nacional de Energía Atómica CNEA - Constituyentes, Av. Gral. Paz 1499, B1650KNA San Martin, Prov. Buenos Aires

³Universidad Nacional de General Sarmiento, Juan María Gutiérrez 1150, B1613 Los Polvorines, Provincia de Buenos Aires

*vpram@cnea.gov.ar

Palabras claves: DIFUSIÓN; ALEACIÓN DE Zr-Sn; MECANISMO DE VACANCIAS

Calculamos los coeficientes de difusión de impurezas y de autodifusión del trazador con el modelo de ocho frecuencias de Ghate [1] en comparación con el modelo de 13 frecuencias desarrollado por Allnatt, Belova y Murch [2] (Fig.1). Específicamente, en la aleación diluida de hcpZr-Sn investigamos el límite de enlace fuerte y el límite de 5 frecuencias del modelo de Ghate. Nuestros cálculos exhaustivos se han realizado utilizando tanto técnicas de estática molecular clásicas (MS) [3] como cálculos ab-initio cuánticos dentro de la aproximación GGA utilizando el código VASP+DIMER [4]. La metodología fue empleada previamente con éxito en el sistema ZrNb [5]. Nuestros cálculos ab-initio muestran que un modelo denominado de 5 frecuencias, sin disociación de pares ni anisotropía en las frecuencias de salto, y que solo necesita tres frecuencias, es lo suficientemente bueno para obtener coeficientes de difusión anisotrópicos del solvente y soluto que están de acuerdo con los datos experimentales encontrados en la literatura para la aleación.

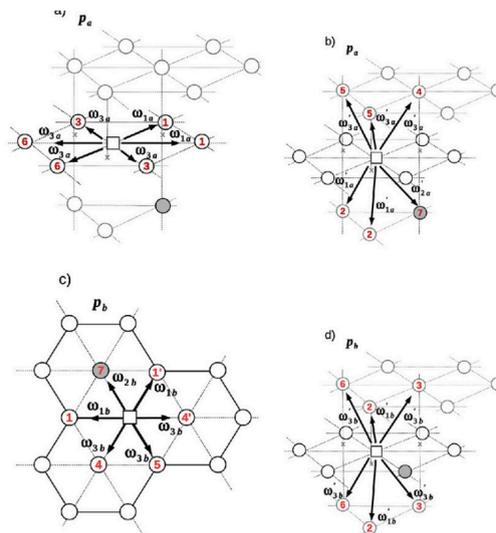


Figura 1. Modelo de multifrecuencia que emplearemos en la aleación.

[1] P. Ghate, Phys. Rev. 133 (1964) A1167.

[2] A.R. Allnatt, I.V. Belova, G.E. Murch, Philos. Mag. 94 (2014) 2487-2504.

[3] V.P. Ramunni, M.A. Alurralde, R.C. Pasianot, Phys. Rev. B 74 (2006) 054113.

[4] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54 (1996) 11169.

[5] V.P. Ramunni, A.M.F. Rivas, Mater. Chem. Phys. 197 (2017) 163-180.



EFECTO DEL HALÓGENO EN LA SIMETRÍA DE LOS SÓLIDOS CRISTALINOS DE LA SERIE DE N,N'-[3,4-DIHALO-1,2-FENILEN]DIACETAMIDAS

E. Rivas Rojas^{1,2*}, P.H. Di Chenna^{1,2}, F. Di Salvo^{3,4}

¹UBA, FCEN, DQO, Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EG CABA

²UMYMFOR (UBA-CONICET) CABA

³UBA, FCEN, DQIAQF, Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EG CABA

⁴INQUIMAE (UBA-CONICET), CABA

*erivas@qo.fcen.uba.ar

Palabras claves: CONTACTO HALÓGENO; QUÍMICA SUPRAMOLECULAR; SIMETRÍA CRISTALINA

El control preciso de la formación de sistemas autoensamblados complejos, como, por ejemplo, los geles supramoleculares, requiere del conocimiento preciso de las interacciones intermoleculares, no covalentes, involucradas [1]. La direccionalidad de dichas interacciones es un aspecto clave que permite el diseño bottom-up de dichas arquitecturas organizadas. Las interacciones de tipo enlace halógeno ($X \cdots B$) o contacto halógeno-halógeno ($X \cdots X$), si bien son interacciones débiles, poseen una alta direccionalidad y pueden ser claves para el diseño de sistemas autoensamblados complejos [2].

Recientemente, en nuestro grupo de trabajo hemos desarrollado una familia de organogelantes supramoleculares basados en N,N'-[3,4-dihalo-1,2-fenilen]dialquilamidas donde se estudió el rol del halógeno y de la longitud de cadena hidrocarbonada. El efecto del halógeno resultó importantísimo definiendo el poder gelante y la estabilidad mecánica de los geles, siendo el mejor gelante el derivado dibromado [3]. En este trabajo presentamos el análisis cristalográfico de los cuatro N,N'-[3,4-dihalo-1,2-fenilen]diacetamidas conteniendo flúor, cloro, bromo y yodo. Sorpresivamente, la simetría de los cristales de la familia depende de la identidad del halógeno, la que a su vez representa un factor clave en el desarrollo de las propiedades supramoleculares. Para los halógenos más pesados (Cl, Br y I), los compuestos cristalizaron en el grupo espacial no-centrosimétrico $P2_12_12_1$ mientras que, para el derivado fluorado, se determinó que cristaliza en el grupo $P2_1/n$, centrosimétrico. Los halógenos en el primer subgrupo participan de enlaces del tipo $X \cdots O$ y $X \cdots X$ mientras que para el compuesto fluorado se evidencian únicamente enlaces del tipo $F \cdots F$ formando un arreglo infinito en zig-zag. En ambos tipos de estructuras se desarrollan enlaces de hidrógeno $N-H \cdots O$ y $C-H \cdots O$ que involucran al grupo acetamida.

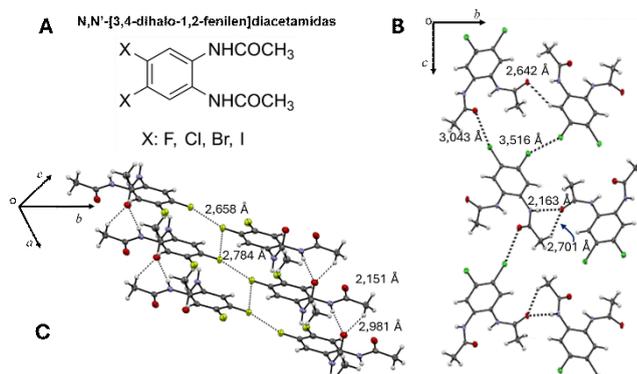


Figura 1. Esquema de serie de N,N'-[3,4-dihalo-1,2-fenilen]diacetamidas (A); interacciones intermoleculares representativas observadas en la estructura del derivado fluorado (B) y clorado tomado como ejemplo de lo que se observa para las estructuras de los derivados con los halógenos más pesados (C).

[1] D.K. Smith, *Soft Matter*, 20 (2024) 10-70.

[2] C.J. Setter et al., *Cryst. Eng. Comm.* 22 (2020) 1687-1690.

[3] A.S. Mac Cormack, V. M. Busch, M. L. Japas, L. Giovanetti, F. Di Salvo, P. H. Di Chenna, *New J. chem.* 44 (2020), 8198-8208.



CAMBIOS ESTRUCTURALES EN MATERIALES DE CAMBIO FASE

J. Rocca^{1,2*}, M.A. Ureña^{1,2}, M. Fontana^{1,2}

¹Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Laboratorio de Sólidos Amorfos. Paseo Colón 850 (1063), Buenos Aires

²CONICET - Universidad de Buenos Aires. Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería “Hilario Fernández Long” (INTECIN), Buenos Aires

*jarocca@fi.uba.ar

Palabras claves: MEMORIAS NO VOLÁTILES; RAYOS X, CRISTALIZACIÓN DE AMORFOS

Las memorias denominadas de cambio de fase funcionan utilizando el alto contraste en la resistencia eléctrica entre los estados amorfo y cristalino de ciertos materiales, en particular se destacan los del sistema binario Sb-Te, ricos en antimonio, por ejemplo, el de composición $Sb_{70}Te_{30}$ (en % atómico). Películas delgadas amorfas de $Sb_{70}Te_{30}$ muestran una fuerte caída en la resistencia eléctrica en un rango de temperatura estrecho cuando se calientan, este cambio es indicativo de la transición amorfo-cristal. Es bien sabido que el agregado de diferentes metales mejora el rendimiento de las memorias de cambio de fase (transiciones más rápidas, mayor rango de temperaturas de uso, etc). Por tanto, es interesante estudiar el efecto de añadir átomos metálicos a la composición $Sb_{70}Te_{30}$. Recientemente hemos realizado estudios estructurales [1, 2] mediante Rayos X y espectroscopía Mossbauer agregando Sn (en diferentes proporciones) a la composición binaria $Sb_{70}Te_{30}$, que cristaliza en una estructura trigonal descrita por el grupo espacial P_{-3m1} . Hemos descubierto que el dopaje con Sn conduce a distorsiones estructurales de la celda unitaria que pueden describirse, para todas las concentraciones de Sn, con el grupo espacial $C_{2/m}$ que es una ligera distorsión de la estructura de la composición binaria. Los parámetros hiperfinos de la espectroscopía de Mössbauer indican que el estaño se comporta como Sn^{2+} (ocupando el sitio Sb1) y ratifica que tiene un ambiente ligeramente distorsionado. En este trabajo presentamos los resultados cuando se agrega Ag a la composición binaria. Realizamos estudios estructurales de muestras cristalinas de composición $Ag_x(Sb_{70}Te_{30})_{100-x}$ ($x = 2.5, 5$ y 7.5 , en % atómico). Además, mediante difracción de rayos X y calorimetría diferencial de barrido hemos estudiado la cristalización de películas delgadas amorfas de composición $Ag_{7.5}(Sb_{70}Te_{30})_{92.5}$ (en % atómico) obtenidas por deposición con láser pulsado.

[1] J.A. Rocca, V. Bilovol, D. Errandonea, A.V. Gil Rebaza, A.M. Mudarra Navarro, H.H. Medina Chanduví, L.A. Errico, B. Arcondo, M. Fontana, O. Cuellar Rodríguez, M.A. Ureña, J. Alloys Compd. 795 (2019) 27-33. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.04.214>

[2] V. Bilovol, M. Fontana, J.A. Rocca, H.H. Medina Chanduví, A.M. Mudarra Navarro, A.V. Gil Rebaza, L.A. Errico, A. Liang, D. Errandonea, A.M. Ureña, J. Alloys Compd 845 (2020) 156307. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156307>



**MODIFICACIÓN DE LAS PROPIEDADES TEXTURALES EN FERRITAS DE LANTANO
DOPADAS CON CALCIO PARA APLICACIONES EN CELDAS DE COMBUSTIBLE
DE ÓXIDO SÓLIDO**

A.J. Rodríguez¹, J.J. Arroyo Gómez^{1,2}, A.L. Larralde^{1,2*}

¹Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), Departamento de Almacenamiento de la Energía. Subgerencia de Energía y Movilidad. Gerencia de Desarrollo Tecnológico e Innovación

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

*alarralde@inti.gob.ar

Palabras claves: FERRITAS DE LANTANO; PROPIEDADES TEXTURALES; ESTRUCTURA CRISTALINA; CELDAS DE ÓXIDO SÓLIDO

Las perovskitas de metales de transición han sido estudiadas para diversas aplicaciones tales como electrodos para celdas de combustible de óxido sólido, dispositivos de memoria magnética no volátil y dispositivos de lectura magnética.

En este trabajo, se sintetizaron ferritas de lantano dopadas con Ca(II) según: $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($x = 0, 0,1$ y $0,2$) mediante una técnica de química suave (complejación por citratos-nitratos) con posteriores tratamientos térmicos. Los sólidos resultantes fueron investigados por difracción de rayos X de polvos (DRX) y refinamientos de Rietveld, análisis termogravimétricos (TGA), absorción de nitrógeno y microscopía electrónica de barrido (SEM). Además, se realizarán estudios de las propiedades electroquímicas de los óxidos mediante espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS) para evaluar su aplicación como electrodo de celdas de combustible de óxido sólido.

Los resultados de DRX indicaron que todas las muestras se obtuvieron en estado puro y que cristalizan bajo el grupo espacial ortorrómbico *Pbnm*. Además, los refinamientos de Rietveld indican una efectiva incorporación del Ca(II) en la estructura evidenciado por una reducción en el volumen de la celda unidad conforme aumenta la concentración nominal de dopante. La Figura 1 muestra el buen acuerdo entre los datos de DRX para la muestra pura y el ajuste por el método de Rietveld.

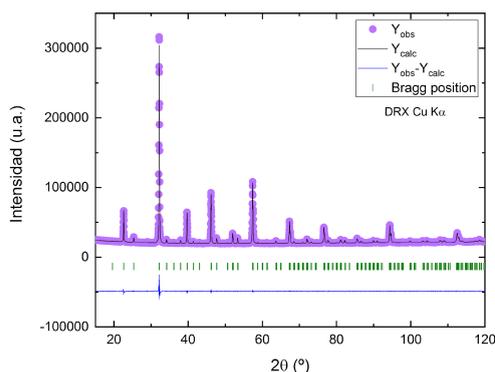


Figura 1. Refinamiento de Rietveld de la muestra LaFeO_3 utilizando difracción de rayos X de laboratorio

Las determinaciones por TGA indican la formación de vacancias de oxígeno. Por otro lado, las isotermas de adsorción de nitrógeno muestran que las muestras presentan baja porosidad comprendida por un volumen muy bajo de microporos seguido de un mayor volumen de meso- y macroporos.

Se presentarán los resultados de EIS y su evaluación como electrodos para celdas de óxido sólido.



ESTRUCTURA CRISTALINA DE ZrO_2 , U Y Si A PARTIR DE FUNDICIÓN EN CRISOL

M. Rodríguez^{1,2*}, J. Giordano³, D.F. Lionello⁴, D. R. Vega⁴, A.M. Benítez⁵, N. Grillo⁵, E. Rada⁵, A. Fontanille⁵, S. González⁵, J.L. Ramella⁶, G. Rossi¹, D. Podestá³, M. Restelli⁷, M. Escobar^{2,8}

¹Div. L,PyC, Dpto. ECRI - CAC - CNEA

²INCALIN - UNSAM - INTI

³Dpto. ECRI - CAC - CNEA

⁴GAIDI - CAC - CNEA

⁵Div. Caracterización de Combustibles Nucleares - CAC - CNEA

⁶Laboratorio de Compuestos de Uranio - CAC - CNEA

⁷Div. Control de calidad - Dpto. ECRI - CAC - CNEA

⁸CONICET

*mrodrig@cnea.gov.ar

Palabras claves: URANIO; ZIRCONIA; ESTRUCTURA CRISTALINA; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; RIETVELD

En el marco del desarrollo de una metodología segura para la recuperación de material nuclear se comenzó a desarrollar una estrategia de recuperación del uranio remanente en los crisoles utilizados para la fabricación de elementos combustibles (EC) y mini-placas en la Planta de Fabricación de Elementos Combustibles para Reactores de Investigación (ECRI). En particular, el siliciuro de uranio (U_3Si_2) es empleado para la fabricación de EC para reactores de investigación. La obtención de U_3Si_2 requiere del proceso de fusión de U-Si con un enriquecimiento $< 20\%$ en U^{235} , donde se obtienen en forma de lingotes. Para la fusión se utilizan crisoles de zirconia (ZrO_2) que, con el objetivo de soportar los cambios de temperatura del proceso, poseen una porosidad controlada. Se pretende recuperar el material que queda infiltrado en la porosidad del crisol.

Teniendo en cuenta este objetivo, se llevaron a cabo diferentes caracterizaciones en los materiales involucrados: determinación de densidad, porosidad, ceramografía y difracción de rayos X (DRX). Mediante la técnica de DRX se obtuvieron difractogramas de las superficies interna (en contacto con el U_3Si_2) y externa del crisol; los mismos se presentan en la Figura 1.

El difractograma de la superficie externa se corresponde con el de ZrO_2 según la búsqueda realizada en base de datos (BD) [1]. Sin embargo, el obtenido en la superficie interna presentó un buen acuerdo con un compuesto de estructura cúbica tipo pirocloro con fórmula química: $(Y, Fe, U)(Ti, Nb, Ta)_2(O, OH)_6$. A partir de este, se modeló una nueva con estructura similar y con los elementos que deberían estar presentes según la composición química del crisol y el lingote. La nueva estructura fue refinada mediante el método

de Rietveld y corresponde a un pirocloro tipo $A_2B_2O_7$ con estructura $Fd\bar{3}m$ y parámetros de red $a=10,3947$ [2]. El U está coordinado por 6 O y 2 Si con un entorno de simetría dodecaédrica, mientras que el Zr está coordinado por 6 O con una esfera de coordinación octaédrica. Del mismo modo, los O y Si exhiben una simetría tetraédrica y estos últimos reemplazan sitios ocupados por O en las estructuras tipo pirocloro.

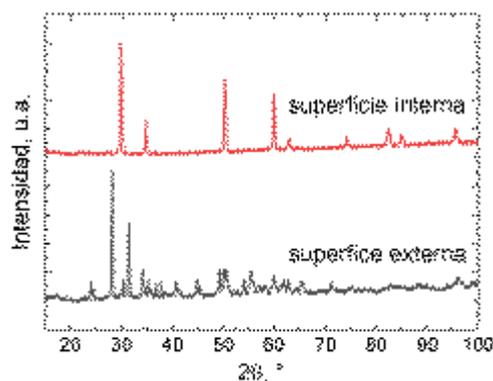


Figura 1. Difractogramas de la superficie interna y externa del crisol.

[1] J. Judes, V. Kamaraj, Materials Science-Poland 32 (2014) 145-156.

[2] Z. Tang., Z. Huang, W. Han, J. Qi, Y. Shi, N. Ma, Y. Zhang, X. Guo, T. Lu, Inorg. Chem. 59 (2020) 9919-9926.



OPTIMIZACIÓN DEL MÉTODO SÍNTESIS DE $\text{Na}_2\text{Zn}_2\text{TeO}_6$ A PARTIR DE LA TÉCNICA DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X (DRX)

R. Salgado^{1*}, S. TERNY¹ y M. Frechero¹

¹INQUISUR - Dpto. de Química - Universidad Nacional del Sur - CONICET

*rocio.salgado@uns.edu.ar

Palabras claves: ELECTROLITO SÓLIDO; ION SODIO; DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Para mejorar el desempeño de las baterías de iones sodio de estado sólido (SiBs) se debe contar con electrolitos sólidos con conductividad eléctrica superior a $1 \text{ mS}\cdot\text{cm}^{-1}$ a temperatura ambiente, pero que no pierda sus propiedades en una amplia ventana de temperatura.

El objetivo de este trabajo es la optimización de la síntesis, por el método de reacción de estado sólido, de conductores de ion sodio de baja temperatura del tipo: $\text{Na}_2\text{M}_2\text{TeO}_6$ (donde M: Zn^{2+} , Ba^{2+}) [1], en busca de la obtención de la mayor cristalinidad y pureza, poniendo especial énfasis en la modificación del paso determinante de la estructura, la oxidación [2].

La principal técnica de caracterización utilizada fue la difracción de Rayos X (DRX). La elección de distintos parámetros experimentales, tales como la rampa de calentamiento utilizada en la etapa de oxidación y el exceso de sodio óptimo a agregar durante la síntesis fueron fundamentados a partir de los difractogramas obtenidos [3]. Por otro lado, esta técnica se utilizó en conjunto con la calorimetría diferencial de barrido (DSC), para lograr una mejor comprensión del comportamiento térmico del material en determinadas regiones de temperatura.

Para complementar la caracterización del material obtenido se utilizaron técnicas tales como la espectroscopía infrarroja con Transformada de Fourier (FTIR) y la microscopía electrónica de barrido (SEM), con el fin de evaluar las características morfológicas del material. La espectroscopía de impedancia (IS) y la cronoamperometría se utilizaron para evaluar la respuesta eléctrica de los materiales obtenidos en función de la temperatura y comprender las características del mecanismo de transporte de los portadores.

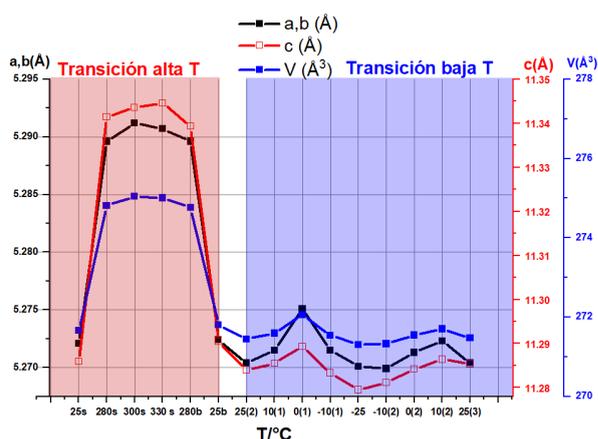


Figura 1. Parámetros estructurales de celda del NZTO en función de la temperatura

[1] M.A. Evstigneeva, V.B. Nalbandyan, A.A. Medvedev, A.A. Kataev, Chem. Mater. 23 (2011) 1174-1181.

[2] A. Itaya, K. Yamamoto, R. Inada, Int. J. Appl. Ceram. Technol. 18 (2021) 2085-2090.

[3] A. Itaya, K. Yamamoto, R. Inada, Y. Sakurai, Mater. Lett. 284 (2021) 128941.



**ISOLATION AND STRUCTURAL DETERMINATION OF DECOMPOSTIN,
A NATURAL PRODUCT FROM *SENECIO SUBULATUS***

H. Sánchez¹, E. Gutiérrez^{2*}, F. Di Salvo³, C. Pungitore¹, H. Garro^{1,4}

¹INTEQUI–CONICET, Área de Química Orgánica, FQBF, UNSL, San Luis

²INQUISAL–CONICET, Área de Química Orgánica, FQBF, UNSL, San Luis

³INQUIMAE–CONICET, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA, CABA

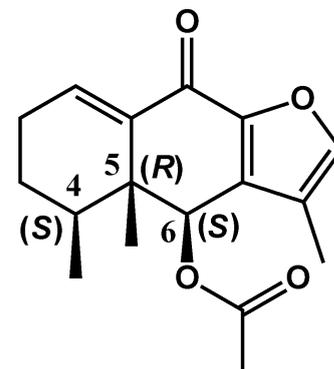
⁴Max Planck Laboratory for Structural Biology, Chemistry and Molecular Biophysics of Rosario (MPLbioR, MPIbpC-UNR).

*egutierrez@unsl.edu.ar

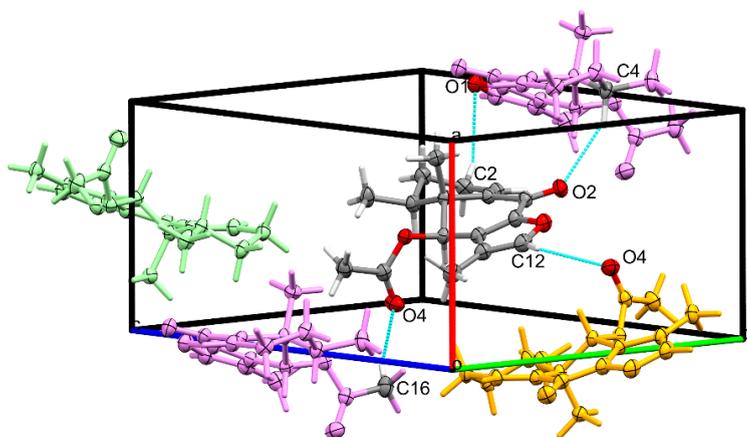
Palabras claves: SENECIO SUBULATUS; NATURAL PRODUCTS; DECOMPOSTIN; SYNCHROTRON X-RAY DIFFRACTION; NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE

Pyrrolizidine alkaloids and furanoeremophilanes are the predominant secondary metabolites in the genus *Senecio L.*, many of which are known for their significant toxicity to livestock in agricultural regions, primarily due to the presence of those metabolites [1]. Some furanoeremophilanes have been reported to exhibit phytotoxic activity which deters herbivory by various insect species [2] and are used in traditional medicine for their anti-inflammatory and antiemetic properties [3]. In this study we have successfully isolated and fully characterized the compound 6 β -acetoxy-9-oxo-10aH-furanoeremophilane (decompostin, Scheme 1) from aerial parts of *Senecio subulatus* from San Juan, Argentina.

Structure resolution of the title compound was carried out by means of SC-synchrotron XRD on the MANACA beamline at Sirius (Brazil) at 100 K. On Table 1 we show the main crystallographic data. The resolution of the structure allowed the determination of the relative and the absolute configurations of chiral carbon atoms (C4, C5, and C6). Methyl groups on C4 and C5 and the ester moiety on C6 are all on the same face of the ring system of the molecule. The absolute configuration of C4 and C6 is S, while the absolute configuration of C5 is R. The main intermolecular interactions stabilizing the crystal structure are several non-classical hydrogen bonds which involve the O atoms of the molecule (Figure 1). RMN spectroscopy data is consistent with the structure solved by XRD. The stereochemistry of decompostin also was confirmed through NOESY.



Scheme 1. Decompostin



Orthorhombic		P 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (19)	
a / Å	7.481(5)	α / °	90
b / Å	12.688(4)	β / °	90
c / Å	15.454(5)	γ / °	90
V / cm ³	1793.09(16)	ρ / g cm ⁻³	1.306
Z	4	λ / nm	0.67019

Figure 1. View of the unit cell of (4S,5R,6S)-decompostin containing four asymmetric units. In light blue, the main non-classic hydrogen bonds found in the structure. (Code. C: grey; H: white; O: red.)

[1] E. Burgueño-Tapia, P. Joseph-Nathan, Magn. Reson. Chem. 41 (2003) 386-390 .

[2] C.L. Cantrell et al., J. Agric. Food Chem. 55(26) (2007) 10656-10663.

[3] Y. Yang, et al., Chem. Biodivers. 8 (2011) 13-72.



INFLUENCIA DEL TRATAMIENTO TÉRMICO EN ATMÓSFERAS DE CARBONO Y NITRÓGENO SOBRE PELÍCULAS DE ÓXIDO DE TITANIO

M. Sequeira^{1*}, L.E. Morinigo^{1,2}, M.R. Tejerina¹, G. Suárez¹

¹Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC), Universidad Nacional de La Plata, CIC, CONICET, Buenos Aires

²Centro de Investigaciones Ópticas de La Plata, Universidad Nacional de La Plata, CIC, CONICET, Buenos Aires

*melanies@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras claves: FILMS; TITANIO; FOTOCATÁLISIS; SEMICONDUCTORES

El dióxido de titanio (TiO_2) es un material semiconductor y fotocatalizador, destacado por sus notables propiedades ópticas y eléctricas. A pesar de sus ventajas, su limitada capacidad para absorber luz ultravioleta ha sido identificada como una desventaja significativa, lo que ha motivado la búsqueda de métodos tanto para mejorar su eficiencia fotocatalítica extendiendo su actividad al espectro visible y aumentar la conductividad eléctrica de las películas. Estudios previos han demostrado que los recubrimientos de TiO_2 pueden ser modificados para reducir la energía de bandgap del rutilo mediante la formación de vacancias de oxígeno durante el tratamiento térmico con polvo de carbono [1]. En base a estos antecedentes, el presente trabajo aborda la influencia del tratamiento térmico con carbono en atmósfera controlada de nitrógeno sobre películas delgadas de TiO_2 . Los tratamientos se realizaron a 300°C durante diferentes intervalos de tiempo (una, dos y tres horas), y se evaluó el efecto producido en sus propiedades estructurales, morfológicas, ópticas y eléctricas. La morfología presentó un aumento en el tamaño de partículas superficiales con el aumento de tiempo del tratamiento. La espectroscopía UV-visible permitió observar una reducción en la transmitancia, reflectancia y en la energía de bandgap directa con el aumento en horas del tratamiento. Mientras que la resistencia eléctrica se incrementó conforme se prolonga el tiempo del tratamiento térmico. Estos resultados preliminares sugieren que el tratamiento térmico aplicado permitió reducir la energía de bandgap directa, lo que resulta deseable para mejorar la eficiencia fotocatalítica de las películas delgadas.

[1] S. Guan, Y. Cheng, L.Hao, Sci. Rep. 13 (2023) 14105.



POLIMORFISMO EN CaCO_3 : DE LA BIOMINERALIZACIÓN A LA NANOMEDICINA

A.L. Soldati^{1,2*}, M.M. Gonzalez^{1,2,3}, P.E. Di Prátula¹, D.E. Tolabin⁴, S.G. Suárez¹, D.G. Lamas^{3,5}

¹Departamento Ciclotrón y Radiofarmacia, Centro Integral de Medicina Nuclear y Radioterapia de Bariloche, INTECNUS- CNEA, San Carlos de Bariloche

²Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA - CONICET), Nodo Bariloche, Av. Bustillo 9500, (8400) S.C. de Bariloche (RN)

³Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM, San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

⁴Departamento de Radioterapia, Centro Integral de Medicina Nuclear y Radioterapia de Bariloche, INTECNUS- CNEA, San Carlos de Bariloche

⁵Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Instituto de Tecnología Emergentes y ciencia Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, San Martín Pcia. de Buenos Aires

*analia.soldati@intecnus.org.ar

Palabras claves: CARBONATO DE CALCIO; POLIMORFISMO; VATERITA; NANOPARTÍCULAS

El carbonato calcio (CaCO_3), un material clásico para observar polimorfismo, viene siendo utilizado desde hace siglos para aplicaciones industriales y como componente de muchos materiales. Recientemente, el tema de su capacidad de transformación de un polimorfo a otro bajo determinadas condiciones (fisiológicas o inducidas externamente) ha tomado un giro interesante: se ha descubierto que esta propiedad puede utilizarse para innovar en el campo de la medicina. Sumado a sus propiedades de alta estabilidad en fluidos biológicos, biocompatibilidad y baja toxicidad, el CaCO_3 está siendo estudiado para aplicaciones como el transporte y la liberación de fármacos en el cuerpo humano.

En fase sólida el CaCO_3 existe tanto amorfo como cristalino, y puede presentarse en formas hidratadas y no hidratadas. Dentro de éstas últimas se hallan los tres polimorfos cristalinos más conocidos: calcita, aragonita y vaterita. A temperatura ambiente y presión atmosférica, la vaterita es de las tres la termodinámicamente más inestable, seguida por la aragonita y la calcita. Con respecto a la estructura, la aragonita pertenece al sistema cristalino ortorrómbico y la calcita al trigonal. La vaterita ha sido históricamente más controversial, aunque actualmente se ha llegado al consenso que pertenece al sistema hexagonal. Por otro lado, el hábito cristalino depende de las condiciones de crecimiento del cristal, y pueden existir varios hábitos distintos para un mismo polimorfo. La calcita, por ejemplo, suele aparecer como cristales romboédricos y prismáticos, la aragonita suele formar cristales prismáticos alargados o aciculares, y la vaterita se reconoce por sus granos policristalinos, esféricos, lenticulares o framboidales, entre otros.

El estudio de procesos de biomineralización ha revelado que, bajo ciertas condiciones ambientales, la vaterita aparece como un intermediario entre la primera precipitación biológica del carbonato de calcio amorfo y la aparición de las fases más estables calcita y/o aragonita. Este efecto también ha sido observado en vaterita sintetizada en laboratorio. En ambos casos, la retención del polimorfo metaestable parece estar relacionada a la conservación de un tamaño de cristal nanométrico, en concurrencia con procesos de disolución y reprecipitación, crecimiento de cristal y aglomeración.

Siendo un material mucho más poroso y de mayor área superficial que los polimorfos aragonita y calcita, la vaterita sintética se estabiliza en aglomerados policristalinos micrométricos, presentando cristalitas que rondan los 100 nm. La morfología de los aglomerados, el tamaño de partícula alcanzado y la pureza polimórfica obtenida por distintas rutas de síntesis son muy dependientes de las condiciones en las que ocurre la precipitación, como la temperatura, el pH, la velocidad de agitación de la solución, el orden de adición de los precursores y la utilización de aditivos. Asimismo, estudios recientes han demostrado que las partículas de vaterita pueden ser cargadas con metales, proteínas, péptidos, macromoléculas, y drogas como insulina, antibióticos, anticancerígenos y fotosensibilizadores, entre otras. La transformación de fase a calcita permite luego la liberación controlada de la droga en los tejidos blanco. En este trabajo se expondrá un resumen de estos avances y las perspectivas a futuro en el área de la nanomedicina.



ESTUDIO DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X EN NANOPARTÍCULAS DE QUITOSANO PARA LIBERACIÓN CONTROLADA DE EMBELINA

A.L. Suares Segura^{1*}, A. Martínez Cebada¹, A. Tapia², G.A. Abraham¹, P.R. Cortez Tornello¹

1 Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA)/Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Mar del Plata, Buenos Aires

2 Instituto de Biotecnología – Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de San Juan, San Juan, 5400, Argentina

**als.suares@gmail.com*

Palabras claves: NANOPARTÍCULAS; QUITOSANO; EMBELINA; CRISTALOGRAFÍA; LIBERACIÓN

La difracción de rayos X (DRX) es una herramienta esencial en la caracterización de materiales, especialmente en el ámbito de la ciencia de los materiales y la nanotecnología. En el contexto de sistemas nanoparticulados, como aquellos basados en quitosano para la liberación controlada del agente terapéutico embelina, el estudio cristalográfico proporciona información crucial sobre la estructura, tamaño y morfología de las partículas, así como sobre la disposición de los fármacos dentro de la matriz polimérica [1].

El quitosano es un polímero natural derivado de la quitina, con excelentes propiedades biocompatibles, biodegradables y mucoadhesivas, lo que lo hace ideal para aplicaciones en sistemas de liberación de fármacos. La embelina, un compuesto bioactivo extraído de las porciones aéreas del arbusto *Embelia ribes*, tiene potencial terapéutico debido a sus propiedades antiinflamatorias, antioxidantes y anticancerígenas [2].

La encapsulación de embelina en nanopartículas de quitosano permite la protección del fármaco de la degradación prematura y posibilita su liberación controlada en el sitio de acción específico. Este control en la liberación del agente mejora la eficacia terapéutica y reduce los efectos secundarios, al mantener concentraciones terapéuticas del fármaco durante períodos prolongados [2][3].

El papel de la cristalografía en este trabajo es de suma importancia para determinar la presencia de las fases cristalinas presentes, y evaluar cómo la incorporación de embelina afecta la estructura del quitosano. Además, proporciona información sobre la distribución del agente terapéutico en la estructura de las nanopartículas y su posible presencia en superficie. La presencia de formaciones cristalinas en la composición de las nanopartículas poliméricas resultan determinantes en los mecanismos cinéticos para la liberación del agente terapéutico en el medio biológico o sitio de acción [4].

Los resultados obtenidos permitieron obtener los espectros de rayos X de quitosano, el agente embelina y las nanopartículas con embelina encapsulada. Se observó la presencia de porciones cristalinas de quitosano en las nanopartículas obtenidas mediante electrospraying. Además, fue posible determinar que no existe presencia del agente terapéutico en la superficie de las partículas, lo que indica que la embelina está totalmente encapsulada.

Podemos concluir que la técnica de DRX y el estudio cristalográfico de las nanopartículas poliméricas de quitosano, permiten identificar la cristalinidad de las partículas, como así también la distribución de los agentes terapéuticos encapsulados. Esto resulta determinante en la liberación controlada de los agentes en el medio biológico.

[1] S. Mourdikoudis, R. Pallares, N. Thanh, *Nanoscale* 10 (2018) 12871-12934.

[2] P.R. Cortez Tornello, G.E. Feresin, A. Tapia, M. Dzieciuch, T.R. Cuadrado, G.A. Abraham, *Adv. Polym. Technol.* 37 (2018) 1570-1580.

[3] P. Mehta, R. Haj-Ahmad, M. Rasekh, A. Smith, S.M. Van Der Merwe, X. Li, M.W. Chang, Z. Ahmad, *Drug Discov.* 22 (2016) 157-165.

[4] N.E. Widjonarko, *Coatings* 6 (2016) 54.



**PEROVSKITAS (La,Sr)TiO₃ DOPADAS CON Pd COMO POTENCIALES ÁNODOS PARA SOFC:
SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y PROPIEDADES FUNCIONALES**

Y.M. Torres¹, F.D. Prado¹, M.D. Sánchez^{1*}

¹Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L.N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca

*msanchez@uns.edu.ar

Palabras claves: IT-SOFC; ÁNODOS; PEROVSKITAS; PALADIO; METANO

El desarrollo de celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia (IT-SOFC) que operen eficientemente con hidrocarburos como el metano es una de las vías para avanzar hacia sistemas energéticos más sostenibles y eficientes. Los ánodos convencionales de Ni/YSZ enfrentan limitaciones a temperaturas intermedias (500-700°C), incluyendo susceptibilidad a la deposición de carbono y envenenamiento por azufre [1]. En este contexto, las perovskitas basadas en SrTiO₃ dopadas con lantano en el sitio A y diversos metales de transición en el sitio B, emergen como candidatos prometedores debido a su potencial para combinar alta conductividad mixta iónica-electrónica con actividad catalítica mejorada [2].

En este trabajo se sintetizaron y caracterizaron cuatro tipos de perovskitas como potenciales ánodos para IT-SOFC: La_{0,3}Sr_{0,7}TiO_{3±δ} (LST), La_{0,3}Sr_{0,7}Ti_{0,90}Pd_{0,10}O_{3±δ} (LST-Pd), La_{0,4}Sr_{0,4}TiO₃ (LST_(-A)), y La_{0,4}Sr_{0,4}Ti_{0,90}Pd_{0,10}O_{3±δ} (LST_(-A)-Pd). El método Pechini modificado permitió obtener la fase de la estructura perovskita, de acuerdo a datos de DRX, a temperaturas más bajas (600-800°C) que las reportadas previamente [3]. La composición LST mostró una conductividad de 18 S/cm a 900°C en atmósfera reductora (5% H₂/Ar), comparable a otros ánodos avanzados para SOFC [4]. Análisis por SEM y XPS indican, para estas condiciones de síntesis, la presencia de partículas de Pd segregadas en la superficie de LST-Pd y LST_(-A)-Pd. Los cuatro materiales resultaron compatibles con electrolitos comúnmente empleados en SOFC [5] presentando coeficientes de expansión térmica (TEC) en el rango de (10-12) × 10⁻⁶ K⁻¹ en diversas atmósferas (Aire, Ar y H₂). La presencia de Pd en ambas muestras mejoró significativamente la actividad catalítica para el reformado húmedo de metano, aumentando la conversión de CH₄ del 1% al 12% para LST-Pd y del 1% al 16% para LST_(-A)-Pd, con alta selectividad hacia H₂ (~80%) y resistencia a la deposición de carbono en ambos casos. El mayor rendimiento de LST_(-A)-Pd puede atribuirse a la presencia de vacancias catiónicas en el sitio A que favorecen la distribución del metal [6]. Estos resultados sugieren que los sistemas basados en (La,Sr)TiO₃-Pd son materiales prometedores para ánodos de IT-SOFC, especialmente para aplicaciones con alimentación directa de metano. Futuros estudios se centrarán en optimizar la dispersión del Pd y evaluar la estabilidad a largo plazo de estos materiales en condiciones operativas de IT-SOFC.

[1] S. Bassil et al., *React. Chem. Eng.* 9 (2024) 1251-1260.

[2] X. Zhou et al., *Rsc Adv.* 4 (2014) 118-131.

[3] S. Hashimoto et al., *J. Alloys Compd.* 397 (2005) 245-249.

[4] A. Atkinson et al., *Nature materials* 3 (2004) 17-27.

[5] V. Kharton et al., *Solid State Ion.* 174 (2004) 135-149.

[6] D. Neagu et al., *Nature chem.* 5 (2013) 916-923.



ELECTRODOS NANOESTRUCTURADOS MULTICAPA BASADOS EN PEROVSKITAS DE $\text{LaNi}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}_{3-\delta}$ SOPORTADOS SOBRE $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO (SOFC) OPERADAS CON BIOGÁS

L.M. Toscani^{1*}, M.K. Macoretta^{1,2}, S.A. Larrondo², D.G. Lamas¹, L.V. Mogni³

¹Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas, CONICET-UNSAM, Laboratorio de Cristalografía Aplicada-Pcia. de Buenos Aires

²Escuela de Hábitat y Sostenibilidad, EHyS-UNSAM, Pcia. de Buenos Aires

³Departamento de Caracterización de Materiales, Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET), Centro Atómico Bariloche, Bariloche, Pcia. de Rio Negro

*ltoscani@unsam.edu.ar

Palabras claves: SOFC; BIOGAS; CeO₂; PEROVSKITA

En el contexto energético actual, las pilas de combustible tipo SOFC se posicionan como una tecnología promisoría para la producción de energía eléctrica de una manera más limpia y eficiente ya que son capaces de reducir las emisiones gaseosas y hacer un uso más eficiente de los combustibles basados en carbono, provenientes tanto de combustibles fósiles como de combustibles de origen renovable (biomasa o biogás), dado que presentan una elevada relación de energía eléctrica generada sobre combustible consumido. Los desafíos incluyen evitar la formación de depósitos de carbono y la reactividad superficial con contaminantes como el H₂S, que pueden afectar la durabilidad del dispositivo. En la actualidad los desarrollos de pilas SOFC existentes operan con un reformador externo de combustible para oxidar el combustible previo a su ingreso al stack de celdas, lo que encarece y complejiza el diseño y construcción del dispositivo. Se busca elaborar estrategias en el diseño racional de electrodos basados en materiales cerámicos y metal-cerámicos nanoestructurados para abrir la posibilidad a la alimentación directa de combustibles en las celdas. Se propone el diseño de electrodos multicapa que permitan separar las reacciones catalíticas y electrocatalíticas en distintas capas funcionales. En la capa catalítica (CC) se podría llevar adelante la deshidrogenación del combustible formando especies de H₂ y CO antes de alcanzar la capa electrocatalítica (CE).

En este trabajo se presentan los resultados del desarrollo de electrodos multicapa basados en perovskitas de $\text{LaNi}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}_{3-\delta}$ (LNFO) soportados sobre $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ (CZO) de dimensiones nanométricas y su evaluación electrocatalítica en operación con biogás sintético (CH₄+CO₂). Se sintetizaron muestras de LNFO y LNFO/CZO mediante la ruta de síntesis química de complejación de cationes con ácido cítrico. Se realizó una caracterización estructural utilizando la técnica de difracción de rayos-X (DRX), se realizaron ensayos de reducción a temperatura programada (TPR), ensayos de actividad catalítica de conversión de biogás sintético en reactor de lecho fijo y ensayos de actividad electrocatalítica para obtener la resistencia de polarización de los electrodos mediante la técnica de espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

Los resultados de difracción de rayos X indican la obtención de la fase perovskita del LNFO y de la fase fluorita del CZO, sin observarse fases secundarias. Luego de realizarse un tratamiento reductor en 50%H₂/N₂ a 700°C fue posible la exsolución del Ni metálico sobre la superficie de la perovskita con la consiguiente segregación parcial de La₂O₃. Los resultados de actividad catalítica para la conversión de biogás muestran que, a temperaturas inferiores a 750°C la muestra de LNFO presenta mayor conversión de CH₄ en comparación con la muestra LNFO/CZ, invirtiéndose marcadamente esta tendencia para temperaturas superiores. Los resultados de producción de CO y de H₂ indican que la muestra LNFO/CZO presenta una mayor selectividad a estos productos en todo el intervalo de temperaturas ensayados frente a la muestra LNFO, presentándose como una catalizar activo, selectivo y con alta tolerancia a la formación de carbono.



INFLUENCIA DE LIGANDOS CARBOXILATO SOBRE LA NUCLEARIDAD DE CLUSTERS Dy(III)/Co(III) CON POTENCIALIDAD COMO MAGNETOS DE MOLÉCULA ÚNICA

N. Vadra^{1,2}, F.D. Cukiernik^{1,2*}, P. Alborés^{1,2}

¹Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

²CONICET– Universidad de Buenos Aires, Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE)

*fabio.cukiernik.inorganica@gmail.com

Palabras claves: MAGNETOS DE MOLÉCULA ÚNICA; CLUSTERS; NUCLEARIDAD; LANTÁNIDOS

Entre los magnetos de molécula única (SMM) basados en lantánidos, los derivados de Dy(III) han sido extensamente estudiados debido a la fuerte anisotropía magnética axial que pueden presentar. Particular atención recibió la familia de los *clusters* que presentan core $\{Co^{III}_2Dy^{III}_2\}$ con estructura *butterfly*, hallados por ejemplo en sistemas con carboxilatos y ligandos quelantes como la dietanolamina (dea). [1] En ese contexto, aprovechando el sitio de anclaje que presenta la dea, preparamos previamente una serie de complejos de Dy(III) y Co(III) con pivalato y derivados de dea sustituida con cadenas alifáticas de n átomos de C: dea-C n . En aquel trabajo, hallamos que para $n = 3$ se preserva la nuclearidad $\{Co^{III}_2Dy^{III}_2\}$ y se obtienen *clusters* tipo *butterfly*, pero para $n = 4 - 10$ se obtienen *clusters* hexanucleares con core $\{Co^{III}_3Dy^{III}_3\}$. [2] Todos esos compuestos presentaron comportamiento tipo SMM, con tiempos de relajación dependientes de n .

El objetivo último de esa derivatización en dea era el de obtener SMM con forma alargada característica de los cristales líquidos calamíticos para acoplar las propiedades magnéticas a la organización supramolecular (ver figura). La aparición de esos *clusters* hexanucleares, más allá de su interesante comportamiento como SMM, frustró esa expectativa. Por ello, resolvimos utilizar como punto de anclaje de las cadenas largas otros ligandos de estos compuestos, apuntando a generar moléculas discoideas alrededor del core hexanuclear. Para ello, utilizamos alcoxibenzoatos en lugar de pivalato, manteniendo dea-C1. Las primeras exploraciones involucraron di- y tri-alcoxibenzoatos de cadena muy corta. Los derivados de 3,5-di(metoxi)benzoato y 3,4,5-tri(metoxi)benzoato generaron *clusters butterfly* con orientación esencialmente radial; el derivado de 3,4,5-tri(etoxi)benzoato generó un *cluster* hexanuclear de core $\{Co^{III}_4Dy^{III}_2\}$, con geometría molecular reminiscente de los CL fasmídicos.

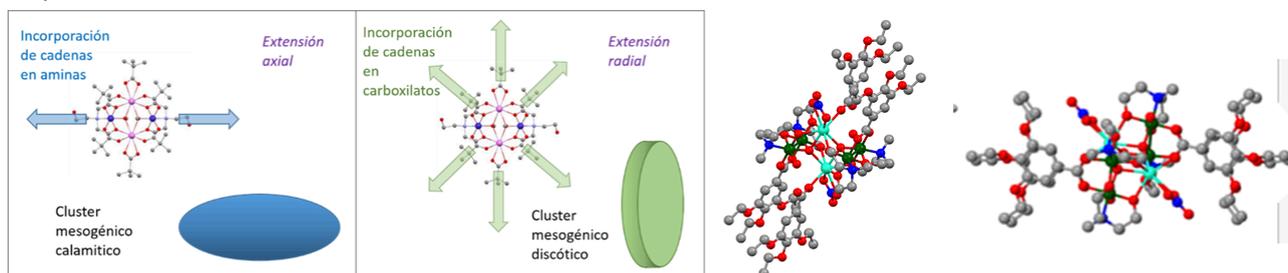


Figura 1. Izq: Estrategia de diseño molecular de mesógenos basados en cores Co/Dy. Der: vista lateral y superior de la estructura molecular del derivado hexanuclear $Dy_2Co_4(O)_2(345B3OC2)_4(dea-C1)_4(NO_3)_2(H_2O)_2$. Código: ●: Dy; ●: Co; ●: N; ●: O; ●: C. Átomos de H omitidos por claridad.

[1] A.V. Funes, P. Alborés, Eur. J. Inorg. Chem. 2018 (2018) 2067.

[2] Ch. Bonnenfant, N. Vadra, M. Rouzières, R. Clérac, F. D. Cukiernik, P. Alborés, Dalton Trans. 53 (2024) 2815-2825.



SÍNTESIS DE MATERIALES ACTIVOS MIXTOS DE $\text{LiMn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{PO}_4$ PARA CÁTODOS DE CELDAS DE ION-LI BASADOS EN ESTRUCTURAS OLIVINAS

R.V. Valenti^{1*}, M. Mizarhi¹, M.P. Quiroga Argañaraz¹, M.G. Ortiz^{1,2}, J.M. Ramallo López¹

¹INIFTA, UNLP-CONICET, Diagonal 113 y 64, CP 1900, La Plata

²Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Materiales (CITEMA), Universidad Tecnológica Nacional - CICPBA, 60 y 124, 1923, Berisso

*romi.valenti@gmail.com

Palabras claves: LMFP; BATERÍAS DE ION LITIO; MATERIALES ACTIVOS

El LiFePO_4 (LFP) es uno de los materiales más estudiados como cátodo en baterías de iones de litio, debido a su bajo costo de producción, alta seguridad y excelente estabilidad. Sin embargo, presenta limitaciones importantes como la reducida conductividad iónica del litio, una densidad energética relativamente baja, y un potencial redox moderado de 3,45 V. En contraste, los materiales basados en LiMnPO_4 (LMP) ofrecen una mayor densidad de energía y un potencial redox más alto (4,1 V), pero son térmicamente inestables y, al igual que el LFP, presentan una conductividad iónica y eléctrica baja [1].

Con el objetivo de desarrollar un material que combine las ventajas del LFP y del LMP, se propuso la sustitución parcial de los átomos de Fe en el LFP por Mn. Dado que el Mn^{2+} posee una estructura *olivina* similar y un radio iónico comparable al Fe^{2+} , puede ser incorporado fácilmente como sustituyente en la red cristalina del LFP, sin comprometer la seguridad ni incrementar significativamente los costos del material final.

En este estudio, se sintetizaron compuestos $\text{LiMn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{PO}_4$ (con $0,2 \leq x \leq 0,8$) mediante un proceso solvotermal utilizando $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$, H_3PO_4 , $\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$, $\text{MnSO}_4\cdot\text{H}_2\text{O}$, y etilenglicol (EG) como solvente, manteniendo una proporción molar $\text{Li}:(\text{Fe}+\text{Mn}):\text{P}$ de 3:1:1. Los productos obtenidos fueron posteriormente calcinados con glucosa, con el fin de mejorar la conductividad eléctrica e iónica de los materiales sintetizados [2]. La estructura y composición química de los materiales sintetizados se caracterizaron mediante Difracción de Rayos X (DRX) y Fluorescencia de Rayos X (FRX), respectivamente. Para evaluar la capacidad de carga/descarga se realizaron medidas electroquímicas a través de ciclos galvanostáticos. Todas las muestras sintetizadas presentaron una estructura *olivina* similar a la del LiMnPO_4 y LiFePO_4 . Los resultados de FRX muestran que la relación Mn:Fe está de acuerdo con las distintas proporciones de sustitución propuestas. Los materiales con menor cantidad de Mn, exhibieron una capacidad de 120 mAh g^{-1} a C/2, lo que representa un aumento del 80% en comparación con el LiFePO_4 bajo las mismas condiciones de ciclado.

[1] Y. Cao, J. Duan, G. Hu, F. Jiang, Z. Peng, K. Du, H. Guo, *Electrochim. Acta* 98 (2013) 183-189.

[2] K. Wu, S. Yin, S. Wang, J. Zhu, W. Yao, *Carbon* 169 (2020) 55-64.



LABORATORIO DE MEDICIÓN DE TENSIONES RESIDUALES EN OBJETOS

M.A. Vicente Alvarez¹, N. Alvarez¹, J. Lohr¹, G. Muñoz Medina¹, J. Santisteban^{1*}

¹Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones, Comisión Nacional de Energía Atómica

*j.r.santisteban@cab.cnea.gov.ar

Palabras claves: TENSIONES RESIDUALES; RAYOS X; ESTUDIO NO DESTRUCTIVO

El Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones es un Centro de Investigación asociado al reactor nuclear RA-10, que está construyendo la CNEA en el predio del Centro Atómico Constituyentes. En este Laboratorio habrá un difractómetro de neutrones especializado en tensiones residuales (ANDES). Complementario a dicho instrumento en el Centro Atómico Bariloche, se desarrolló el Laboratorio para la medición de Tensiones residuales en Objetos. Este laboratorio dispone de un difractómetro de Rayos X optimizado en medición de tensiones residuales marca StressTech [1], de una pulidora electroquímica portátil marca Struers [2] y de mesas posicionadoras.

En esta oportunidad se mostrará como caso de estudio la medición de tensiones residuales en tubos curvados de Inconel fabricados por CONUAR para uso como intercambiador en centrales térmicas. Estos tubos son tratados superficialmente con un proceso de granallado que les confiere tensiones residuales compresivas, las que son beneficiosas para mejorar la resistencia a la fatiga. La medición se realizó a tres profundidades para caracterizar la zona de influencia del granallado. El método utilizado es el $\sin^2\psi$ [3].

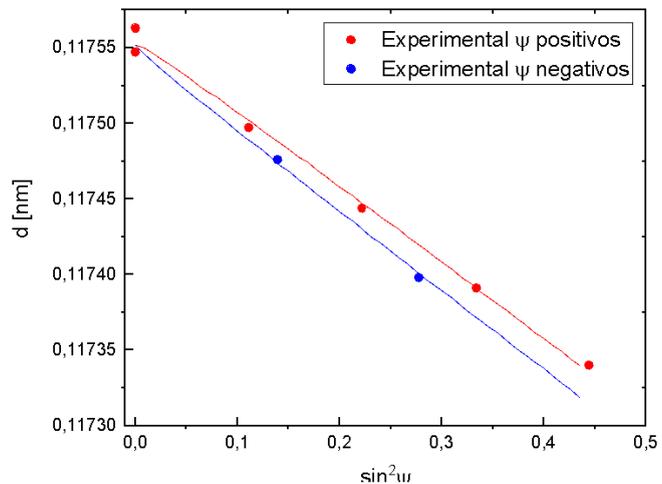


Figura 1. a) Arreglo experimental para la medición de los tubos curvados, b) ejemplo de las curvas $\sin^2\psi$ para la determinación de las tensiones residuales.

[1] Xstress G2 X-ray Diffractometer - Stresstech.

[2] Equipos de preparación electrolítica MoviPol en Struers.com.

[3] M.E. Fitzpatrick, A.T. Fry, P. Holdway, F.A. Kandil, J. Shackleton, L. Suominen, Determination of Residual Stresses by X-ray Diffraction, Measurement Good Practice Guide No. 52, National Physical Laboratory, UK (2005).



ANÁLISIS DE TEXTURA CRISTALOGRÁFICA DE OBJETOS POR EXPERIMENTOS DE TRANSMISIÓN DE NEUTRONES

M.A. Vicente Álvarez¹, F. Malamud^{1,2}, J.R. Santisteban^{1*}

¹Comisión Nacional de Energía Atómica – Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones

²Paul Scherrer Institute, Suiza

*J.R.Santisteban@cab.cnea.gov.ar

Palabras claves: BORDES DE BRAGG; TEXTURA CRISTALOGRAFICA; CIRCONIO; COBRE; ALUMINIO

La transmisión de neutrones térmicos a través de un objeto metálico policristalino presenta saltos bruscos en intensidad llamados bordes de Bragg, para neutrones cuya longitud de onda es igual al doble de una de las distancias interplanares del material (Figura 1). La altura de los bordes y la estructura de la transmisión entre los mismos depende de la orientación de la pieza respecto al haz de neutrones, a través de una integral de línea sobre las figuras de polos usualmente utilizadas en la determinación de textura cristalográfica. La medición de la transmisión para distintas orientaciones obtenidas al rotar el objeto alrededor de un eje perpendicular al haz de neutrones permite caracterizar la textura del mismo, y en principio determinar en forma cuantitativa su función de distribución de orientaciones (ODF). Esto puede realizarse desarrollando la ODF como una serie en una base del espacio de orientaciones SO_3 (los tres ángulos de Euler o ángulos equivalentes), y ajustando los coeficientes de la serie por medio de un ajuste de cuadrados mínimos sobre las transmisiones medidas a distintas orientaciones. En la práctica, la base más eficiente depende de la microestructura del material. Describimos aquí dos modelos diferentes para obtener la ODF del material: (i) un modelo basado en armónicos esféricos generalizados simetrizados para microestructuras de granos pequeños y texturas relativamente continuas [1], (ii) un modelo basado en un conjunto de orientación localizadas, con un ancho fijo, para materiales de tamaño de grano grandes y texturas dominadas por pocas orientaciones principales [2].

Los modelos serán presentados y validados a través de experimentos realizados en objetos producidos de distintas aleaciones de uso común (base aluminio, base cobre, base circonio).

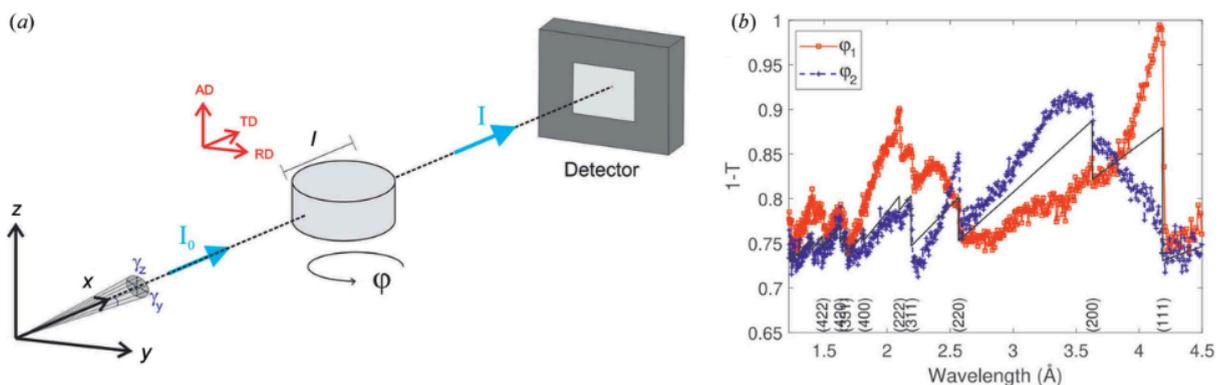


Figura 1. (a) Arreglo experimental, (b) Transmisión de una pieza de cobre texturado, para dos orientaciones.

[1] M.A. Vicente Alvarez, F. Malamud, J.R. Santisteban, J. Appl. Crystallogr. 56 (2023) 1721.

[2] F. Malamud, J.R. Santisteban, M.A. Vicente Alvarez, M. Busi, E. Polatidis, M. Strobl, J. Appl. Crystallogr. 56 (2023) 143.



MEDICIÓN DE LAS FIGURAS DE POLOS GENERALIZADAS DE UN TUBO DE PRESIÓN DE ZrNb MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE ALTA ENERGÍA

M.A. Vicente Alvarez¹, C. Buioli², P. Vizcaino², J. Santisteban^{1*}

¹Laboratorio Argentino de Haces de neutrones, Comisión Nacional de Energía Atómica

²Departamento de tecnología del Circonio, Comisión Nacional de Energía Atómica

*j.r.santisteban@cab.cnea.gov.ar

Palabras claves: TEXTURA; TENSIONES RESIDUALES; TUBO DE PRESIÓN; CIRCONIO

Los tubos de presión de ZrNb (circonio-niobio) son componentes esenciales en la industria nuclear, especialmente en reactores de agua pesada (CANDU). Estos tubos actúan como barreras entre el combustible nuclear y el refrigerante, soportando altas presiones y temperaturas sin comprometer la integridad del reactor. La aleación de ZrNb es elegida por su excelente resistencia a la corrosión, bajo coeficiente de absorción de neutrones y alta estabilidad mecánica [1]. La microestructura, tensiones residuales y textura cristalina de los tubos de presión de ZrNb son factores críticos que determinan su desempeño en reactores nucleares. La microestructura afecta directamente la resistencia mecánica y la resistencia a la corrosión. Las tensiones residuales, originadas durante el proceso de fabricación, pueden influir en la deformación y el agrietamiento bajo condiciones de operación. La textura cristalina, que describe la orientación preferencial de los granos, es crucial para optimizar las propiedades anisotrópicas del material, como la expansión bajo radiación y la resistencia a la fluencia [2].

La difracción de rayos X es una técnica poderosa para caracterizar defectos, textura y tensiones en materiales como los tubos de presión de ZrNb. Esta técnica permite detectar imperfecciones cristalinas, medir la textura cristalográfica y cuantificar tensiones residuales de forma no destructiva. Al analizar el patrón de difracción, se pueden obtener datos precisos sobre la estructura interna del material, y como esta depende de la orientación de los granos. Esta información es accesible a partir de la construcción de las figuras de polos generalizadas: de d-spacing, FWHM y área del pico de difracción. Su interpretación no es directa y requiere métodos de deconvolución [3]. En este trabajo se mostrarán los avances que se han realizado en la interpretación de las figuras de polos generalizadas aplicados al caso de un tubo de presión de ZrNb para tres condiciones de proceso (Figura).

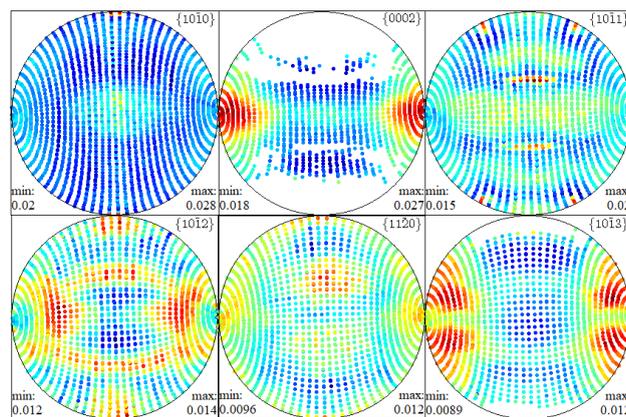


Figura 1. Figura de polos de FWHM para un tubo de presión de ZrNb laminado en frío.

[1] R.B. Adamson, C.E. Coleman, M. Griffiths, J. Nucl. Mater. 521 (2019) 167-244.

[2] Assessment and Management of Ageing of Major Nuclear Power Plant Components Important to Safety: CANDU Pressure Tubes, in: IAEA TECDOC 1037, IAEA (1998).

[3] M.A. Vicente Alvarez, C. Buioli, J. Santisteban, P. Vizcaino, Acta Materialia 271 (2024) 119802.

XII TALLER DE LA AACR

Avances en técnicas cristalográficas para el estudio de
materiales para la energía

CONFERENCIAS SEMIPLLENARIAS Y CONTRIBUCIONES ORALES



CAMINO A COMPRENDER LAS CLAVES PARA LA ESTABILIZACIÓN DE LAS FASES CONDUCTORAS EN SÓLIDOS POLICRISTALINOS

M.A. Frechero*

Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur (UNS), INQUISUR- CONICET, Av. Alem 1253, Bahía Blanca, C.P. 8000, Argentina

*frechero@uns.edu.ar

Palabras claves: CONDUCTORES IÓNICOS SÓLIDOS; SODIO; LITIO; CERÁMICOS

Buena parte del quehacer de la ciencia se encuentra abocada hoy al desarrollo de materiales innovadores para su aplicación en seguridad, energías limpias, transporte, salud humana, salud animal y productividad industrial. El diseño de materiales a la medida para sus diversos usos busca optimizar recursos, potenciar capacidades, impulsar la economía circular y, fundamentalmente, proteger el medioambiente. Para impulsar tal innovación científica es necesario avanzar en la comprensión de las propiedades físicas y químicas desde la macro-escala hasta la nano-escala, esto requiere poder correlacionar con gran certeza las características estructurales con el desempeño funcional buscado a partir de la interpretación de los resultados experimentales desde un enfoque múltiple.

En esta presentación, analizaremos tres casos de materiales policristalinos diseñados como conductores iónicos de estado sólido, en particular, para su potencial aplicación en acumulación electroquímica de energía. Veremos cómo la interpretación de la respuesta de técnicas eléctricas, térmicas, ópticas y mecánicas nos permitieron reinterpretar y potenciar los resultados del análisis estructural obtenidos de la difracción de Rayos X.

En el primer caso, veremos cómo se lograron optimizar los tratamientos térmicos de una familia de estructuras de tipo NASICON dopadas $\text{Li}_x\text{Zr}_y\text{M}_{0.1}(\text{PO}_4)_3$ [$\text{M} = \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}, \text{Zn}^{2+}, \text{Y}^{3+}, \text{Ce}^{4+}$] y, de la purificación de la fase lograda, comprender el efecto de la relación radio-carga del dopante necesario para aumentar la conductividad del ion litio. El segundo conductor, el $\text{Na}_2\text{Zn}_2\text{TeO}_6$ que es un excelente conductor de iones sodio bidimensional de baja temperatura, permitió comprobar la hipótesis de dos transiciones reversibles orden/desorden sodio/vacantes en la estructura y su efecto sobre la conductividad eléctrica total. Por último, mostraremos cómo la adición de B_2O_3 al $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ permite un dopado mínimo que inicialmente facilita la conductividad del ion Na^+ , pero que en concentraciones mayores la sustitución está desfavorecida, aunque generara un ambiente en el que la cristalización se ve mejorada.

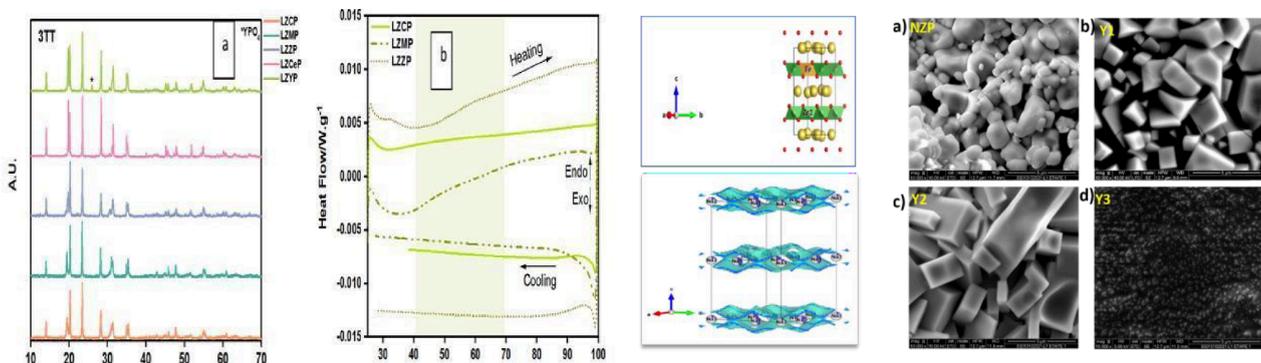


Figura 1. Difractogramas de la familia $\text{Li}_x\text{Zr}_y\text{M}_{0.1}(\text{PO}_4)_3$ [1]; estructura planos conductores de iones sodio en el $\text{Na}_2\text{Zn}_2\text{TeO}_6$; mejora de la cristalización del $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ en presencia de B_2O_3 .

[1] S. Torny, C. López, G. Narda, M.A. Frechero. Ceram. Int. 48 (2022) 31755-31762.



**RECUBRIMIENTOS DE NÍQUEL RANEY COMO ELECTRODOS
PARA ELECTRÓLISIS ALCALINA**

F. Fagiano¹, J.E. Vega Castillo^{1,2*}, M.A. Florida Addato¹, A. Caneiro^{1,2}, M. Fonticelli^{2,3},
C. Smal^{1,2}

¹YPF Tecnología, Berisso, Provincia de Buenos Aires

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET

³Universidad Nacional de La Plata - CONICET, La Plata

*jesus.e.vegacastillo@set.ypf.com

Palabras claves: NÍQUEL RANEY; ELECTRÓLISIS ALCALINA; CÁTODO; ÁNODO

Un electrolizador alcalino (EA) es un dispositivo electroquímico que permite disociar moléculas de agua generando H₂ y O₂ con alta eficiencia y que puede ser escalado sin necesidad de utilizar metales preciosos. La celda base de un EA consta de dos electrodos donde ocurren las reacciones de generación de H₂ (cátodo) y O₂ (ánodo), en una solución alcalina y separados por una membrana porosa [1]. Los materiales de cátodo se basan típicamente en Ni debido a su resistencia a la corrosión y bajo costo, pero requieren tener altas áreas superficiales debido a la baja corriente de intercambio del Ni para la reacción de formación de hidrógeno molecular (HER) comparado con metales como el Pt o el Ir [2].

En Y-TEC se vienen fabricando electrodos de alta área superficial obtenidos a partir de aleaciones precursoras de Ni-Zn y Ni-Al sometidas a un tratamiento de disolución selectiva, que permite la extracción del metal menos noble generando una estructura porosa. Este tipo de catalizadores se conocen como Níquel Raney [2].

Los electrodos fueron caracterizados estructuralmente mediante Difracción de Rayos X (XRD) y XRD en incidencia rasante, donde se identificaron las fases cristalinas presentes y se evidenció la recristalización de las fases que son atacadas selectivamente. Esto permitió comprender la estructura cristalina inicial de los precursores, qué fases son estables y cuáles son atacadas durante el tratamiento de disolución. Asimismo, cuál es la estructura cristalina de los materiales resultantes.

Mediante observaciones de microscopía electrónica de barrido (SEM) y de transmisión (TEM) se estudió la morfología y microestructura tanto de las aleaciones precursoras como del Níquel Raney. Los electrodos obtenidos a partir de los dos tipos de aleaciones mencionadas presentan uniformidad y alta porosidad en escalas micro y nano. La composición química de las aleaciones, antes y después del tratamiento de disolución, fue estudiada por Espectroscopías de Rayos X Dispersiva en Energía (EDS) y de Emisión Atómica con Plasma de Acoplamiento Inductivo (ICP-OES). De esta manera se estimaron los porcentajes de Zn y Al, según el caso, que fueron removidos de las aleaciones originales y la cantidad remanente en el catalizador poroso obtenido.

Finalmente, los electrodos de Níquel Raney, a escala de laboratorio, fueron caracterizados electroquímicamente a temperatura ambiente y de operación (70 °C) en KOH 30% p/p, para evaluar su área superficial activa, sus sobrepotenciales en función de la densidad de corriente y estudiar su comportamiento a largo plazo.

Este estudio permite evaluar viabilidad de estos materiales para su implementación en un electrolizador alcalino industrial.

[1] P. Millet, Fundamentals of Water Electrolysis, Wiley (2015).

[2] S. Rausch & H. Wendt, J. Appl. Electrochem. 22 (1992) 1025-1030.



DISEÑO, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CONDUCTORES MIXTOS BASADOS EN $\text{Sr}_{11}\text{Mo}_4\text{O}_{23}$ DOPADOS CON Fe Y Co

D.H. Lizarraga^{1*}, C.D. Miranda², E. Zelaya³, M.T. Fernandez-Diaz⁴, J.A. Alonso⁵, M.E. Saleta^{2,6}, C.A. López¹

¹INTEQUI (CONICET-UNSL), Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950, San Luis

²Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA-CONICET, Av. Bustillo 9500 - S.C. de Bariloche

³CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500 - S.C. de Bariloche

⁴Institut Laue-Langevin, BP 156-38042, Grenoble Cedex 9, France

⁵Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid, España

⁶Instituto Balseiro, U.N. Cuyo-CNEA, Av. Bustillo 9500 - S.C. de Bariloche

*lizarragadiego99@gmail.com

Palabras claves: SOFC; ENERGÍA; $\text{Sr}_{11}\text{Mo}_4\text{O}_{23}$, MIEC

En la actualidad la ciencia de materiales presenta un rol preponderante en el campo de la energía desarrollando nuevos materiales para mejorar las eficiencias de los dispositivos de almacenamiento o interconversión de energía como son las celdas de combustible. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de nuevos sistemas con potencial aplicación en dispositivos de conversión de energía, específicamente para cátodos de celdas de combustible de óxido sólido, SOFC (*solid oxide fuel cell*).

En el grupo de trabajo se ha reportado la fase $\text{Sr}_{11}\text{Mo}_4\text{O}_{23}$ (SMO) como un posible electrolito para SOFC (conductor de iones O^{2-}) [1,2]. Además, se ha logrado incrementar la conductividad iónica de esta fase, mediante dopajes con elementos de transición aliovalentes d^0 como Ti y Nb [3,4].

Con el objetivo de incorporar conductividad electrónica obteniendo así conductores mixtos (MIEC *mixed ionic electronic conductivity*) para cátodos en SOFCs, se sintetizaron fases dopadas con metales de transición con electrones d^n : $\text{Sr}_{11}\text{Mo}_{4-x}\text{B}_x\text{O}_{23-6}$, con B = Fe y Co. Los sistemas obtenidos mediante síntesis por el método del citrato con diferentes dopajes se analizaron por Difracción de Rayos X y Neutrones en temperatura donde se refinaron las estructuras por el método Rietveld (figura 1a) obteniendo tanto parámetros estructurales como micro-estructurales y de composición. Además, se presenta el estudio de la conductividad en el rango de temperaturas habituales de operación (400 a 850 °C), mostrando valores comparables con cátodos en SOFC previamente reportados (figuras 1b y 1c). Además, se llevaron a cabo caracterizaciones por dilatometría de los sistemas obtenidos con el fin de analizar su compatibilidad mecánica con materiales comúnmente utilizados en estos dispositivos. Se complementan con estudios de Resonancia Paramagnética Electrónica, para analizar la valencia del Mo y de Microscopía Electrónica de Barrido y Transmisión, para examinar su morfología.

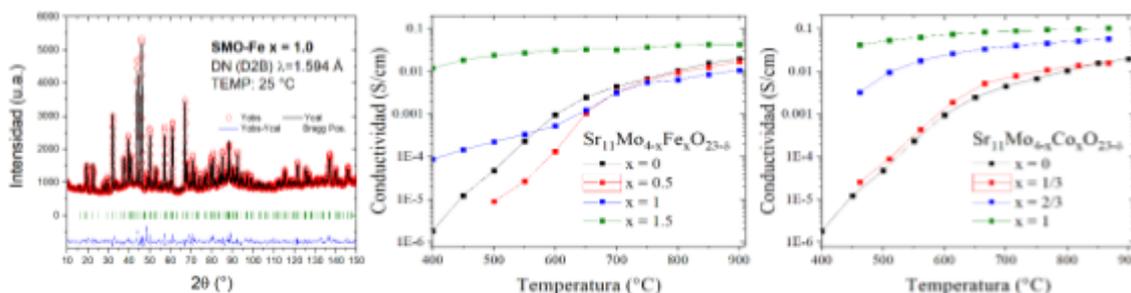


Figura 1. a) Difractograma NPD ($\lambda=1.594 \text{ \AA}$) refinado para el sistema $x\text{Fe} = 1.0$, y temperatura ambiente. Evolución térmica de la conductividad de la muestra para diferentes dopajes de b) Fe y c) Co.

[1] C.A. López y col., J. Appl. Cryst. 47 (2014), 1395-1401.

[2] C.A. López y col., J. Appl. Cryst. 49 (2016), 78-84.

[3] C.D. Miranda y col., Dalton Trans. 46 (2017), 3934-3942

[4] C.A. López y col., RSC Adv. 7 (2017), 16163-16172.



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



DESCUBRIENDO LAS ARCILLAS: UN VIAJE DESDE LA TIERRA HASTA LA INNOVACIÓN

M.J. Bentabol*

Dpto. Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía. Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. Blvr. Louis Pasteur, 31, 29010, Málaga, España

**bentabol@uma.es*

Palabras claves: ARCILLAS; MINERALES DE LAS ARCILLAS; APLICACIONES; MICROSCOPIA ELECTRÓNICA; DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Las arcillas son tan antiguas casi como nuestro planeta y están muy relacionadas con el origen de la vida [1], ya que la presencia de agua y ciertos gases como el oxígeno alteró determinados minerales de las rocas y los transformó en estos minerales.

De hecho, se sabe que estos minerales están estrechamente ligados a la vida en nuestro planeta y a la especie humana, que lleva empleando esta materia prima desde la antigüedad en todas las civilizaciones. Las arcillas endurecidas, secadas al sol o cocidas, se conocen en diversas civilizaciones. A partir del siglo I a. C., se sabe que los sumerios y los egipcios usaban tabletas de arcilla cocida para escribir. Pero no es hasta comienzos de la era cristiana cuando se establece un uso generalizado de la arcilla (cerámica, construcción, pigmentos), lo que da lugar a una industria importante con un alto grado de perfección. Sin embargo, no es hasta principios del siglo XIX, con el descubrimiento de la difracción de rayos X, cuando se realiza un estudio científico sistemático que permite adaptar los diferentes tipos de arcilla a cada clase de industria. Algunas de las razones que explican su elevada aplicabilidad son que se trata de minerales muy abundantes en la corteza terrestre, ecológicos, baratos y muy versátiles.

Este “viaje” comienza con una breve introducción a las arcillas y los minerales que las forman, en la que se identifican sus propiedades más importantes, ya que lo que hace que estos pequeños tesoros tengan un elevado número de usos y aplicaciones se debe a su pequeño tamaño y a su estructura laminar, que les confieren unas propiedades tan particulares e importantes desde el punto de vista industrial y tecnológico.

Para identificarlos y caracterizarlos para su uso posterior, es necesario comentar algunas de las técnicas más importantes que se utilizan en la mineralogía de las arcillas, como la difracción de rayos X y la microscopía electrónica, tanto de barrido como de transmisión. La primera de ellas nos proporciona información de tipo composicional y, mediante la segunda, obtenemos estudios morfológicos y texturales.

Una vez que tengamos conocimiento de qué son y cómo se caracterizan, se introducirán varios ejemplos de su empleo desde la Prehistoria en construcción, decoración, elaboración de figuras artísticas, así como su uso en la elaboración de utensilios, aplicación en cosmética y medicina.

En la siguiente parada del itinerario se destacará el desarrollo de nuevos materiales que incorporan arcillas para mejorar la resistencia y durabilidad de los productos. En la industria farmacéutica, las arcillas se utilizan en la formulación de medicamentos y en la liberación controlada de fármacos. Por otro lado, el interés por la sostenibilidad ha impulsado la investigación en el uso de arcillas como materiales ecológicos, para su aplicación en bioconstrucción, producción de biocombustibles, reducción de las emisiones de CO₂, elaboración de componentes para paneles solares, entre otros.

Terminaremos este fascinante recorrido con algunas pinceladas de las utilidades de las arcillas relacionadas con el campo de la energía.

[1] J.T. Klopogge, H. Hartman, *Life* 12 (2022) 259. <https://doi.org/10.3390/life12020259>



**ESTIMACIÓN DE COMPOSICIÓN MINERAL EN ROCAS SEDIMENTARIAS
A PARTIR DE ELEMENTOS QUÍMICOS Y REDES NEURONALES**

E. Camilión^{1*}, J.L. Gómez¹, L.A. Tórtora¹, M. Cipollone¹

¹YPF Tecnología (Y-TEC), Berisso (1923), Argentina

*emilio.camilion@ypftecnologia.com

Palabras claves: RED NEURONAL; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; FLUORESCENCIA DE RAYOS X

Consideramos aquí la problemática de la estimación de la composición mineral de rocas utilizando como dato de entrada los elementos químicos medidos con Fluorescencia de Rayos X (FRX). Usualmente, la generación de este tipo de modelos mineralógicos es a partir de una inversión matemática que transforma las concentraciones de elementos químicos en concentraciones mineralógicas. Sin embargo, crear este modelo matemático no es una tarea sencilla [1], ya que la composición química de los minerales y la suposición de la presencia o ausencia de un mineral específico se necesitan como entrada para el modelo. Además, la presencia de un mismo elemento químico en más de un mineral hace que el número de incógnitas sea mayor al número de ecuaciones; por lo que no hay, en general, una solución única. En base a las dificultades presentadas, se buscó desarrollar un modelo mineralógico de redes neuronales utilizando el aprendizaje automático. La principal ventaja de la utilización de este tipo de modelos es que no se necesita un conocimiento previo de la composición de los minerales, lo que reduce la subjetividad del modelo. Las concentraciones químicas de muestras de roca obtenidas a través de mediciones de FRX se utilizarán como entradas para el modelo, y la mineralogía obtenida a partir de datos de difracción de rayos X (DRX) serán las salidas. Se utilizó una Red Neuronal Artificial para extraer las relaciones entre los datos de FRX y los de DRX. Basándonos en trabajos previamente publicados [2, 3], se eligió trabajar con arquitectura de redes neuronales superficiales, esto es con una cantidad reducida de capas ocultas. Los datos para la generación del modelo provienen de muestras de roca de diferentes formaciones de cuencas sedimentarias productivas de la Argentina, contabilizando 508 puntos que contaban con medición por FRX y DRX. Como datos de entrada de la red neuronal se seleccionaron sólo 13 elementos. La salida del modelo consiste en el porcentaje de filosilicatos, cuarzo, carbonatos (calcita + dolomita) y plagioclasas presentes en la muestra. La estrategia de cuantificar sólo los compuestos mayoritarios y no aquellos minerales presentes en menor concentración apunta a reducir el error en la predicción. Para probar la capacidad predictiva del modelo, analizamos diferentes escenarios. En el primero, ajustamos un modelo utilizando todos los datos disponibles. En el segundo, ajustamos un modelo utilizando sólo los datos de una zona específica. En el tercer escenario, ajustamos un modelo utilizando todos los datos, excepto los de la zona específica. Los resultados de estos análisis permitieron evaluar cómo la selección de datos afecta la precisión del modelo. En nuestro análisis de escenarios, encontramos que el modelo que mejor funciona es el que se ajustó utilizando más del 50% de los datos de una zona específica. Este modelo proporcionó las predicciones más precisas para todos los minerales analizados. En comparación, los otros dos modelos (ajustados con todos los datos o sin los datos de la zona específica) también mostraron un buen rendimiento, pero en menor medida. Estos modelos funcionaron correctamente en la predicción de la presencia de cuarzo y carbonatos, pero tuvieron un rendimiento inferior en la predicción de filosilicatos y plagioclasas.

[1] R. Freedman, S. Herron, V. Anand, M. Herron, D. May, D. Rose, SPE Reserv. Evaluat. Eng. 18 (2015) 599-608.

[2] J.J. Kim, F.T. Ling, D.A. Plattenberger, A.F. Clarens, A. Lanzirrotti, M. Newville, C.A. Peters, Comput. Geosci. 156 (2021) 1-11.

[3] M. Nawal, B. Shekar, P. Jaiswal, Lead. Edge 42 (2023) 421-432.



CARACTERIZACIÓN DE POLITIPOS DE ILLITA EN LA FORMACIÓN VACA MUERTA: IMPLICANCIAS EN EL ORIGEN Y DIAGÉNESIS

T. Muñoz^{1*}, C. Ferreyra¹, S. Alé¹, L. Vigiani¹, L. Gómez Peral¹, D. Licitra², D.G. Poiré¹

¹Centro de Investigaciones Geológicas (CIG – CONICET – UNLP), La Plata, Buenos Aires

²YPF S.A.

*tmunoz@cig.museo.unlp.edu.ar

Palabras claves: ARGILOMINERALES; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; DIAGÉNESIS; PROCEDENCIA

Las arcillas son un grupo de minerales dentro de los filosilicatos que presentan una estructura laminar y propiedades características. Diversos autores han utilizado estos minerales para realizar inferencias sobre las condiciones paleoclimáticas [1] o el grado de diagénesis que los sedimentos pueden haber sufrido, por lo cual el estudio de su origen a través del análisis de los politipos de las arcillas y sus micromorfologías es una herramienta de suma relevancia. El análisis de los politipos de la illita permite la diferenciación entre arcillas de origen diagenético (variantes $1M_d$ y $1M$) y detrítico ($2M_1$) [2]. Por otra parte, para confirmar su origen, el análisis de la micromorfología y las relaciones espaciales de los argilominerales resulta indispensable. Una vez confirmado el origen, el porcentaje de capas expansivas de los interestratificados illita-esmectita (I/S) permite conocer el grado de madurez termal al cual fueron sometidos y por ende también el de la materia orgánica, pudiendo así deducir el tipo de hidrocarburo que se haya generado [3]. La Formación Vaca Muerta (FVM) del Jurásico superior - Cretácico inferior es una sucesión sedimentaria marina caracterizada por su composición mixta carbonática-siliciclástica, de grano fino y altos valores de TOC. Estos atributos la posicionan como uno de los principales yacimientos de hidrocarburos no convencionales del mundo.

Este trabajo tiene como propósito caracterizar los politipos de los argilominerales mediante difracción de rayos X (DRX) de la FVM en el área de Chos Malal (NW de la Cuenca Neuquina) para definir su posible origen y distribución. Además, se evalúa el grado de madurez termal a través del análisis de los I/S de la formación en distintos sectores de la Cuenca. Por otra parte, el origen de los argilominerales es constatado mediante microscopía electrónica de barrido (MEB). La composición promedio de los argilominerales determinada por DRX es: I/S (43%), illita (38%), clorita e interestratificado clorita-esmectita (19%) y caolinita (3%). Los politipos de la illita identificados son: $1M_d$ cuyos picos diagnósticos se encuentran en 4,49 Å; 3,32 Å y 2,57 Å, acompañado del politipo 2M con los picos característicos en 4,46 Å; 3,33 Å y 2,55 Å.

En conclusión, los politipos caracterizados indican dos orígenes contrastantes para la illita. Por un lado, uno de origen detrítico, representado por una illita $2M_1$, con micromorfologías que respaldan este origen y por el otro, uno de origen diagenético asociado a la illita $1M_d$ evidenciado por el crecimiento autigénico de la illita. Este último, es interpretado como producto de la transformación de esmectita a illita durante la diagénesis de soterramiento. Por otra parte, en los DRX analizados se observó que los I/S presentan entre 30-55% de capas expansivas obtenidos por el método de Powell [4]. El porcentaje de capas expansivas en los interestratificados I/S, varían en sentido SE-NW, mostrando una tendencia a disminuir hacia el NW. Esto último permite interpretar una diagénesis diferencial variando de una mesodiagénesis temprana (ventana de petróleo) a una mesodiagénesis tardía (ventana de petróleo y gas) en esa transecta.

[1] M. Thiry, Earth-Science Reviews, 49 (2000) 201-221.

[2] R.M. Pollastro, Clays Clay Miner. 41 (1993) 119-133.

[3] G. Grathoff, D.M. Moore, Clays Clay Miner. 44 (1996) 835-842.

[4] T.G. Powell, A.E. Foscolos, P.R. Gunther, L.R. Snowdon, Geochim. Cosmochim. Acta. 42 (1978) 1181-1197.



XIX REUNIÓN ANUAL ASOCIACIÓN ARGENTINA DE CRISTALOGRAFÍA

6-8 de noviembre de 2024 – La Plata/Berisso



ESTUDIOS OPERANDO CON TÉCNICAS DE LUZ SINCROTRÓN DE MATERIALES CATÓDICOS PARA LA NUEVA GENERACIÓN DE BATERÍAS DE ION-LI

J.M. Ramallo López*, M.P. Quiroga Argañaraz, K. Jori, M.D. Mizrahi, L.J. Giovanetti, F.G. Requejo, M.G. Ortiz, A. Visintín

INIFTA (UNLP, CONICET), Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina

**ramallo@inifta.unlp.edu.ar; ramallolopez@gmail.com*

Palabras claves: LFP; XANES; OPERANDO; SINCROTRÓN; LITIO

Los laboratorios de luz sincrotrón producen haces de rayos X sintonizables, altamente colimados y con un alto flujo. A través de su interacción con la materia es posible estudiar estructuras cristalinas, amorfas y complejas de manera detallada en condiciones operando, es decir mientras los materiales están en estado operativo, pudiendo así obtener información referente a los mecanismos de reacción involucrados en los sistemas de estudio. Las técnicas basadas en luz sincrotrón permiten además estudiar los sistemas a través de experimentos con resolución espacial submicrométrica, pudiendo realizar la reconstrucción de fases y estructuras, como así también estudiar inhomogeneidades de los materiales. El conocimiento que esta información nos brinda sobre el comportamiento de los materiales en una aplicación será fundamental para entender los procesos involucrados y resultará muy útil para modificar y optimizar los métodos de síntesis y fabricación de nuevos materiales.

En esta charla se presentan resultados obtenidos por nuestro grupo del INIFTA a través de experimentos combinados de espectroscopia de absorción de rayos X y difracción de rayos X en condiciones operando de baterías de ion litio de diferentes materiales catódicos sintetizados en nuestro laboratorio con el agregado de óxidos de grafeno reducido (rGO). Se busca así mejorar la comprensión de los procesos fisicoquímicos involucrados en la carga/descarga de las baterías y aportar información que permite optimizar los métodos de síntesis con el agregado de materiales a base de carbono como el rGO. Finalmente se muestran resultados de difracción de rayos X con resolución espacial micrométrica que muestran en forma directa la difusión del Li en los materiales catódicos.



TRANSFORMACIÓN DE FASE SCHEELITA-PEROVSKITA CON EXSOLUCIÓN DE NANOPARTÍCULAS EN MATERIALES $\text{Sr}_{(1-\alpha)}\text{Mo}_{(1-\beta)}\text{Ni}_\beta\text{O}_{3-\delta}$ COMO ÁNODOS PARA SOFC

P.C. Rivas Rojas^{1,2*}, L. Sánchez de Bustamante³, L. Troncoso², J.A. Alonso³

¹Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, Escuela de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Buenos Aires

²Instituto de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Austral de Chile, Valdivia, Chile

³Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid, España

*privasr@unsam.edu.ar

Palabras claves: EXSOLUCIÓN; SOFC; ÁNODO

La incorporación de nanoestructuras en los electrodos de celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) es una alternativa atractiva para incluir materiales con propiedades de interés en cantidades pequeñas, maximizando el área superficial y su actividad catalítica. En el caso de los materiales para ánodo que operan en una atmósfera reductora, es posible promover la exsolución espontánea de nanopartículas metálicas al inducir deficiencias en el sitio A de materiales tipo perovskita $\text{ABO}_{3-\delta}$, caracterizados por ser conductores mixtos iónicos electrónicos (MIEC), ideales para esta aplicación, debido a que pueden acomodar gran cantidad de vacancias de oxígeno.

La reacción de exsolución $\text{A}_{(1-\alpha)}\text{BO}_{3-\delta} \rightarrow (1-\alpha)\text{ABO}_{3-\delta} + \alpha\text{B}$ [1] puede adaptarse a un sistema tipo $\text{A}_{(1-\alpha)}\text{B}_{(1-\beta)}\text{C}_\beta\text{O}_{3-\delta}$, para el cual existen tres posibles casos dependiendo de la proporción entre $(1-\alpha)$ y $(1-\beta)$. En este trabajo se estudia el sistema $\text{Sr}_{(1-\alpha)}\text{Mo}_{(1-\beta)}\text{Ni}_\beta\text{O}_{3-\delta}$ barriendo composiciones con $\alpha, \beta = 0.05, 0.10$ y 0.15 , considerando las excelentes propiedades reportadas para $\alpha = 0.1, \beta = 0.1$ como material de ánodo de SOFCs [2].

De acuerdo con el análisis de DRX de las muestras mostrado esquemáticamente en la Figura 1, la fase scheelita transforma a la fase perovskita tras un tratamiento a 1050°C en formingas ($5\% \text{H}_2/95\% \text{N}_2$), y durante la transformación de fase ocurre de manera espontánea la exsolución de nanopartículas mono y bimetalicas. Esto es corroborado mediante el análisis de difracción de Neutrones y SEM-EDX de algunas de las muestras.

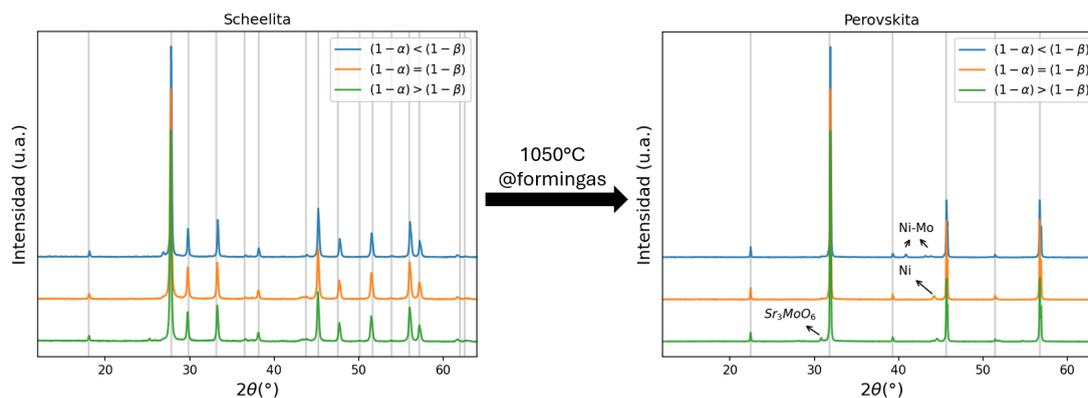


Figura 1. Efecto del tratamiento térmico en atmósfera reductora en los patrones de difracción de Rayos X para las tres posibles proporciones de $(1-\alpha)$ y $(1-\beta)$, las líneas verticales corresponden a las estructuras scheelita y perovskita respectivamente

El análisis termogravimétrico en aire de las muestras reducidas corrobora la ganancia de masa durante la oxidación, a partir del cual se cuantifican las vacancias de oxígeno en cada muestra y medidas de potencia y conductividad eléctrica confirman las excelentes propiedades de este sistema para ser aplicado como ánodo de SOFC, alcanzando hasta $1\text{W}/\text{cm}^2$ y $1100\text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ respectivamente a 850°C para la muestra con $\alpha = \beta = 0.15$.

[1] O. Kwon et al., J. Phys. Energy 2 (2020) 032001. <https://doi.org/10.1088/2515-7655/ab8c1f>

[2] A.L. Larralde et al., New J. Chem. 45 (2021) 12041-12049. <https://doi.org/10.1039/D1NJ02295D>



NANOESTRUCTURAS DE HIDRÓXIDOS BIMETÁLICOS DE INTERÉS EN DISPOSITIVOS DE ENERGÍA

M.A. Salguero Salas¹, F.E. Lurgo², M. Vásquez Mansilla², D.M. Arciniegas Jaimes³, G. Tommasone³,
V.C. Fuertes^{3*}, O.E. Linarez Pérez³, N. Bajales Luna¹

¹IFEG-CONICET, FAMAF-UNC. Av. Medina Allende S/N, Córdoba (5000)

²INN-Nodo CAB. Av. Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche (8400), Río Negro

³INFIQC-CONICET, FCQ-UNC. Av. Haya de la Torre esq. Av. Medina Allende S/N, Córdoba (5000)

*vfuertes@unc.edu.ar

Palabras claves: HIDRÓXIDOS; SÍNTESIS; NANOESTRUCTURAS; MORFOLOGÍA; MAGNETISMO

Los compuestos nanoestructurados basados en óxidos o hidróxidos de metales conformados por capas bidimensionales han despertado gran interés como materiales de electrodo para dispositivos de almacenamiento de energía debido a su alta reversibilidad electroquímica, buena estabilidad y alta capacitancia específica, además de proporcionar gran área superficial [1]. Entre ellos, los hidróxidos bimetálicos de Co y Ni tienen un alto potencial para servir como electrodos eficientes debido a sus diferentes estados redox ($\text{Co}^{3+/2+}$ y $\text{Ni}^{3+/2+}$) y morfologías ajustables [2].

En el presente trabajo se exploran las propiedades de nanolaminas de hidróxidos bimetálicos de Co y Ni, para diferentes composiciones, mediante una combinación de caracterizaciones: estructural, morfológica, elemental y magnética. Los resultados obtenidos por difracción de rayos X (DRX) muestran la presencia de hidróxidos para cada relación molar Co:Ni evaluada con diferentes grados de cristalinidad para las proporciones estudiadas (Fig. 1a). Mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) (Fig. 1b) se determinó la morfología de las nanoestructuras sintetizadas, mientras que la composición elemental y el espesor de los correspondientes sistemas se obtuvieron a partir de espectroscopia de energía dispersiva (EDS) y microscopía de fuerza atómica (AFM) (Fig. 1c), respectivamente. Además, se caracterizaron las propiedades magnéticas (SQUID-VSM) de las composiciones estudiadas, obteniendo comportamientos con distintas tendencias respecto de la temperatura y los campos magnéticos aplicados.

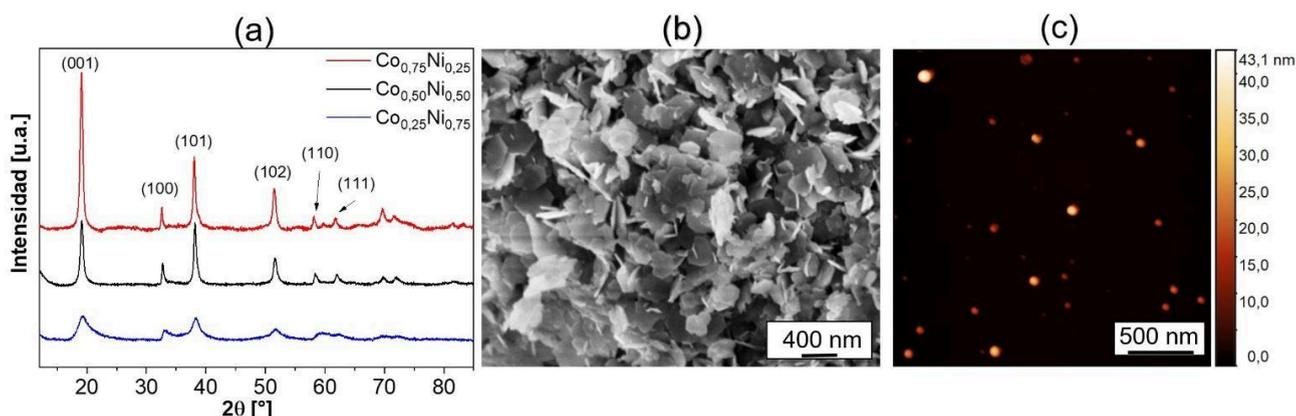


Figura 1. (a) Patrones de DRX para las composiciones de $\text{Co}_x\text{Ni}_{1-x}(\text{OH})_2$ con $x = 0,25, 0,50, 0,75$; imágenes de SEM (b) y de AFM (c) para la muestra $\text{Co}_{0,50}\text{Ni}_{0,50}(\text{OH})_2$.

[1] D. Rajesh, M.K. Francis, P. Balaji Bhargav, A. Nafis, C. Balaji, J. Alloys Comp. 898 (2022) 162803.

[2] H. Chen, L. Hu, M. Chen, Y. Yan, L. Wu, Adv. Funct. Mater. 24 (2014) 934-942.

ÍNDICE DE AUTORXS

- Abellán G. 81
Abraham G.A. 109
Abratti Bogdanich V. 38
Acosta J.J. 69
Acuña L.M. 96
Alarcón E. 69
Alborés P. 86, 112
Alday J. 26
Alé S. 123
Alí F.L. 36, 39, 93
Alonso J.A. 120, 125
Alvarez C.E. 38
Alvarez H.A. 40
Álvarez M.V. 50
Álvarez Manso M.A. 66
Alvarez N. 114
Anaya R.J. 41, 52
Arcentales M.B. 42
Arceo I.N. 26
Arciniegas Jaimes D.M. 126
Aristizábal M.E. 97
Arneodo Larochette P. 83
Arrieta D. 49
Arroyo Gómez J.J. 103
Asto E. 43
Aurelio G. 21
Azcárate J.C. 39
Baggio R. 54, 72, 86
Bajales Luna N. 126
Bava Y.B. 89
Bejarano N. 44
Benítez A.M. 104
Benito D. 58
Bentabol M.J. 121
Bercoff P.G. 50
Bernini M.C. 79
Biangardi M.R. 45
Blanco M.C. 53
Blanco M.M. 91
Blasi A.M. 46
Block D.F. 46
Bojorge C.D. 96
Bolivar Ávila S.J. 47
Booth F. 52
Botta P.M. 50, 51, 80
Bottoso T. 85
Boudard M. 57
Breard C. 76
Brizuela C. 95
Brondino C.D. 54, 72
Brusau E. 31
Buioli C. 116
Butera A. 27
Cabrera I.M. 48
Cadranel A. 26
Cajiao Checchin V.C. 49
Calderón P.A. 50, 51, 80
Calvo N.L. 85
Camargo J. 88
Camilión E. 122
Caminoa J. 95
Campos D. 58
Candal R.J. 98
Caneiro A. 119
Canneva A. 77
Carbonio R.E. 16, 28
Carlevaro C.M. 40
Carranza B. 52
Casella M. 55
Castro F. 62
Castro G.R. 73
Castro M. 88
Cattaneo R. 95
Ceolín M. 15
Chiaromonte N.L. 53
Cipollone M. 71, 76, 122
Citta M.M. 54, 72
Collo G. 95
Colombo F. 53
Conconi M.S. 41, 58
Contini V. 25
Correa-Muriel D. 55
Cortés L.I. 65
Cortez Tornello P.R. 109
Corvalán Moya C. 56
Costabel M.D. 19
Cousido-Siah A. 40
Crespi A.F. 54
Cukiernik F.D. 86, 112
Czwalinna J. 51
Dalosto S.D. 54, 72
De Paoli J. 16, 28
Di Chenna P.H. 101
Di Luozzo N. 57
Di Prado V. 58
Di Prátula P.E. 17, 108
Di Salvo F. 26, 31, 75, 91, 101, 106
Do Campo M. 61
Donadelli J.A. 77
Dufou L. 59
Durán F. 64
Echaide C. 78
Echeverría G.A. 44, 63, 87
Ellena J. 14
Erben M.F. 44, 63
Escobar M. 104
Espinosa Silva Y.R. 40
Esteche J. 44
Facelli J.C. 33
Fagali N. 49
Fagiano F. 119
Falcón M.A. 60, 61
Fanovich M.A. 50, 51, 80
Faudone S. 95
Fechner D. 62
Fernández J. 99, 100
Fernandez-Diaz M.T. 120
Ferraro M.B. 33
Ferrería S. 58
Ferreya C. 123
Figueroa S. 42
Fischer A. 71
Floridia A. 36, 78
Floridia Addato M.A. 119
Fontana M. 57, 102
Fontanille A. 104
Fonticelli M.H. 36, 39, 93, 119
Fraga G.G. 63
Franco D.G. 90
Franco M.A. 32, 64
Frechero M.A. 29, 105, 118
Freire Espeleta E. 65, 67
Fuchs M.V. 80
Fuentes-García J. 49
Fuertes M.C. 20
Fuertes V.C. 126
Garbarino G. 57
García Londoño V.A. 98
García M.G. 53
Gardey Merino M.C. 35, 59
Garrido Bravo J.I. 59
Garro H. 106
Gauna M.R. 66
Gaztañaga P.E. 67
Gennari F.C. 8,
Germanier A. 95
Gilbert U.E. 90
Giordano J. 104
Giovanetti L.J. 89, 124
Giussi J.M. 74
Gómez Albarracín F.A. 34
Gomez Barroso J.A. 48

Gomez G.E. 30, 79
 Gómez J.L. 122
 Gómez Peral L. 123
 Gonzalez M.M. 17, 68, 108
 González Mues T. 78
 Gonzalez P.J. 72
 González Pelegrí E. 71
 González S. 104
 Goya G. 49
 Grillo N. 104
 Guerrero J.F. 61
 Gutiérrez E. 31, 106
 Guzzetti A. 76
 Halac E. 65
 Heredia E.A. 90, 96
 Hernández L.A. 69
 Hernández M.F. 41
 Herrera F.C. 70
 Herrera M.L. 98
 Howard E.I. 40
 Huck-Iriart C. 43, 81
 Iborra A. 74
 Ilari S. 62
 Irvicelli K. 71, 76, 77
 Islan G.A. 73
 Iturriaga C. 75
 Izeta A. 95
 Jaramillo-Hernández C. 81
 Jios J. 87
 Jori K. 89, 124
 Joubert J.M. 56
 Kardellass S. 56
 Kaufman T.S. 47, 85
 Kemmerer A. 54, 72
 Koch C. 93
 Ladetto M.F. 73
 Lamas D.G. 17, 18, 25, 42, 43, 68, 73, 108, 111
 Larghi E.L. 47
 Larralde A.L. 25, 103
 Larrondo S.A. 111
 Lavorato G.C. 36, 39, 93
 Lázaro-Martínez J.M. 54
 Ledesma G.N. 47
 Legarto C. 74
 Leiva S. 62
 Licitra D. 123
 Lick I. 55
 Lima E.J. 50
 Linarez Pérez O.E. 126
 Lionello D.F. 85, 104
 Lisa M.N. 38
 Lisoni J. 92
 Lizarraga D.H. 120
 Lohr J. 16, 114
 Londoño Calderón C.L. 92
 Lopez Borda M.R. 75
 López C.A. 23, 25, 30, 120
 López P.V. 41
 Lorenzo G. 94
 Loubes M.A. 60
 Loyza I. 71, 76
 Lund A.M. 33
 Lupori T.V. 66
 Lurgo F.E. 16, 126
 Macoretta M.K. 111
 Maggiori E. 58
 Maignan A. 28
 Malamud F. 115
 Manrique-Holguín M. 77
 Mardones L. 78
 Martiarena N. 89
 Martin C. 28
 Martínez Cebada A. 109
 Martínez-Villarroel R.J. 79
 Marziali-Bermudez M. 86
 Massad W.A. 79
 Matilla L.D. 80
 Melo A. 62
 Melone M. 27
 Mendoza Zélis P. 93
 Miceli F. 59
 Mignino J. 95
 Miranda C. 23, 120
 Miskoski S. 79
 Mizrahi M. 81, 124
 Mocciaro A. 41, 52
 Mogni L.V. 27, 111
 Monroy L. 82
 Montaña M.P. 79
 Morales M.D. 83
 Moreira F. 58
 Moreno M.S. 45
 Moreno R. 94
 Morinigo L.E. 84, 107
 Moroni A.B. 85
 Morosi M. 58
 Movilla F. 35, 75
 Müller F. 86
 Muñoz Medina G.A. 16, 114
 Muñoz T. 123
 Muraca D. 36
 Narda G.E. 30
 Narváez E. 87
 Nievas S. 59
 Nishi E. 88
 Nóbile J. 95
 Nossa D.L. 63
 Nossa Gonazález D.L. 89
 Núñez García J.L.M. 90
 Oestreicher V. 81
 Okulik N. 52
 Oppezzo G.A. 91
 Ordóñez Obando D.F. 92
 Orendt A.M. 33
 Orozco Henao J.M. 36, 93
 Orsetti N.G. 94
 Ortiz Arriaga M.L. 59
 Ortiz M.G. 89, 113, 124
 Osorio-Vargas P. 55
 Ospina Ramírez C.A. 36
 Oubiña C. 65
 Padró J. 77
 Pagola G.I. 33
 Pampillo L.G. 69, 92
 Paoletti L. 58
 Pascuet M.I. 99, 100
 Pasquevich G.A. 93
 Pastrana G. 59
 Pedregosa J.C. 23
 Perassi I. 95
 Pereyra A.M. 45
 Pérez A.L. 54, 72
 Pérez Coll D.M. 94
 Piro O.E. 44, 63, 87
 Pizzio L.R. 77
 Podestá D. 104
 Poiasina M.P. 96
 Poiré D.G. 123
 Polcowñuk I. 41
 Ponce V.D. 30
 Ponzinibbio A. 44, 63
 Prado F.D. 82, 97, 110
 Pschunder F. 70
 Pugnaire S. 76
 Pungitore C. 106
 Quintero Gómez M.C. 97
 Quiroga Argañaraz M.P. 89, 113, 124
 Quiroga B. 62
 Rada E. 104
 Rafti M. 74
 Raimundi V. 78
 Ramallo López J.M. 89, 113, 124
 Ramella J.L. 104
 Ramos C.A. 54, 72
 Ramos C.P. 69
 Ramos Ramos M.R. 98
 Ramunni V.P. 99, 100
 Reinoso M. 65
 Rendtorff N.M. 41, 52
 Rengifo-Herrera J.A. 77
 Requejo F.G. 89, 124
 Restelli M. 104
 Rey J.M. 75

Richard D. 41, 89
 Rivas Marquina A. 26
 Rivas Rojas E. 101
 Rivas Rojas P.C. 35, 92, 125
 Rizzi A.C. 72
 Robledo A. 95
 Rocca J. 102
 Rocco C. 66
 Rodríguez A.J. 103
 Rodríguez M. 104
 Romanutti C. 95
 Romero J. 74
 Ronco N. 77
 Rosales H.D. 34
 Rossi G. 104
 Russo M. 31
 Saccone F.D. 69
 Saleta M. 16, 27, 120
 Salgado R. 29, 105
 Salguero Salas M.A. 126
 Sánchez de Bustamante L. 125
 Sánchez H. 106
 Sánchez M.D. 110
 Sánchez R.D. 16
 Sandobal J. 75
 Santarelli A. 47
 Santiago C.C. 44
 Santiso J. 43
 Santisteban J.R. 22, 114, 115, 116
 Saraceni H. 35
 Sartoris R. 72
 Sasiambarrena L.D. 63
 Sequeira M. 107
 Shmidt M.S. 91
 Silva D. 62
 Smal C. 119
 Soldati A.L. 17, 68, 108
 Soares Segura A.L. 109
 Suárez G. 25, 94, 107
 Suarez S. 54, 72
 Suárez S.A. 26
 Suárez S.G. 17, 108
 Svartz G. 59
 Tapia A. 109
 Tejerina M.R. 84, 107
 Terny S. 29, 105
 Testero S.A. 47
 Tolabin D.E. 17, 108
 Tommasone G. 126
 Torres Y.M. 110
 Tórtora L.A. 122
 Toscani L.M. 35, 42, 111
 Troncoso L. 92, 125
 Ulic S. 87
 Ulla M.A. 32, 64
 Ureña M.A. 102
 Urteaga R. 72
 Vadra N. 112
 Valenti R.V. 113
 Van Deun R. 30
 Varela K.N. 33
 Vásquez Mansilla M. 126
 Vega Castillo J. 78, 119
 Vega D.R. 18, 67, 85, 104
 Vega I.N. 74
 Velazquez Rodriguez D. 16
 Vericat C. 36, 39, 93
 Vicente Álvarez M.A. 114, 115, 116
 Vigiani L. 123
 Villa Pérez C. 78
 Visintín A. 124
 Vivas Arellanos M. 16, 28
 Vizcaino P. 116
 Weihmuller P. 95
 Wunderlin C. 95
 Zamaro J.M. 32, 64
 Zapata A.J. 72
 Zelaya E. 120
 Zimicz M.G. 82
 Zysler R. 50

