



**IfiSur**  
Instituto de física del sur



# “Bahía: una nanopartícula con muchas propiedades”

Gabriela F. Cabeza  
gcabeza@uns.edu.ar

Departamento de Física - UNS  
IFISUR - CONICET  
Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos  
(GRUMASICA)  
Bahía Blanca



# ¿Dónde estamos?



Nanopartícula



Propiedades



# ¿Dónde investigamos?



1956

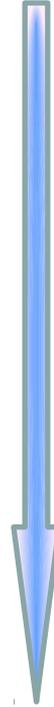


PLAPIQUI: 1963

INIBIBB: 1970

CRIBABB: 1978

CCT: 2007



**IfiSur**  
Instituto de Física del Sur

2010

En la actualidad se cuenta con *líneas de investigación* en física básica y aplicada en las siguientes áreas:

- ✓ **Energías Sustentables**
- ✓ **Ciencia de Materiales**
- ✓ **Catálisis Computacional**
- ✓ **Física Computacional**
- ✓ **Medio Ambiente**
- ✓ **Física Atómica**
- ✓ **Oceanografía**
- ✓ **Vibraciones y Acústica**
- ✓ **Física Médica**
- ✓ **Nanociencia**
- ✓ **Materia condensada blanda**
- ✓ **Polímeros y sistemas complejos**

Los líderes de las diferentes grupos de investigación son:

**Dra. Gabriela Cabeza**  
**Dr. Norberto Castellani**  
Dr. Walter Cravero  
Dr. Gustavo Gasaneo  
**Dr. Alfredo Juan**  
Dr. Sebastián Otranto  
Dr. Hernán Ritacco  
Dr. Fernando D. Prado  
Dr. Miguel Sánchez  
Dr. Daniel Vega  
Dr. Sergio Vera.



**Grumásica**

10/11/2003

# Grumásica

## GRUpo Materiales Sistemas CAtalíticos

**Director:** CASTELLANI, NORBERTO JORGE

**Integrantes:**

**Investigadores CONICET**

BELELLI, PATRICIA  
BRANDA, MARIA MARTA  
CABEZA, GABRIELA FERNANDA  
FERULLO, RICARDO MARIO  
FUENTE, SILVIA ANDREA  
ZUBIETA, CAROLINA EDITH

**Investigadores NO CONICET**

GARDA, GRACIELA RAQUEL  
RODRIGUEZ, ANGEL HORACIO

**Becarios y Tesistas**

DOMANCICH, NICOLÁS  
FORTUNATO, LEANDRO  
GÓMEZ GUILLERMINA  
MEIER LORENA  
MORGADE CECILIA  
OTERO SOL  
PASCUCCI BRUNO  
ROSSI ANA  
REIMERS, WALTER GUILLERMO

# Grumásica

Modelamiento de las propiedades físico-químicas de materiales y sistemas catalíticos.

Área del conocimiento relativa a la Ciencia y Tecnología de los Materiales desde el punto de la simulación y el modelamiento teóricos de las propiedades físico-químicas que gobiernan las aplicaciones de materiales y catalizadores de última generación.

Se consideran las propiedades de catalizadores metálicos no soportados o formando nanopartículas soportadas, las propiedades de catalizadores óxidos no soportados, y la reactividad de materiales semiconductores y de sistemas bimetálicos en forma de multicapas. Se realiza un estudio detallado a nivel mecánico-cuántico de las interacciones químicas y físicas entre los átomos o moléculas participantes de un dado fenómeno o propiedad. Recientemente se ha puesto énfasis en aquellos sistemas que aportan innovaciones con aplicaciones relativas al medio ambiente, particularmente los sistemas nanoparticulados.

# Grumásica

## Proyectos. Financiamiento

*"Estudio teórico de materiales, mecanismos e interacciones en reacciones catalíticas de interés tecnológico"* (PICT). Dir: Dr. N.J. Castellani.

*"Simulación de fenómenos fisicoquímicos en nuevos materiales de interés tecnológico"* (PIP). Dir: Dr. N.J. Castellani.

*"Modelización de las propiedades fisicoquímicas de materiales y de sistemas catalíticos"* (PGI). Dir: N.J. Castellani.

*"Relación nanoestructura-actividad en reacciones seleccionadas, industrialmente importantes para la producción de energía"* (PGI). Dir: Dra. G. F. Cabeza.

*"Modelado Químico-Cuántico de Materiales Catalíticos basados en Oro"* (PICT) Dir: R.M. Ferullo.

*"Estudio de las interacciones molécula sustrato y de los mecanismos de*

# Grupo Dr. Juan

Director: JUAN, ALFREDO

## Integrantes:

### Investigadores CONICET

ARDENGHI SEBASTIAN  
BRIZUELA GRACIELA  
CORRAL IGNACIO  
GERMANI ESTEFANÍA  
GONZÁLEZ ESTELA  
JASEN PAULA  
LUNA ROMINA  
PIRILLO SILVINA  
PISTONESSI CAROLINA  
PRONSATO ESTELA  
SIMONETTI SANDRA

### Investigadores NO CONICET

GESARI SUSANA  
IRIGOYEN BEATRIZ

### Becarios y Tesistas

10

## Grupo Dr. Juan

Fenómenos de adsorción, absorción, reactividad, difusión y segregación, entre otros, que intervienen a nivel molecular sobre interfaces metálicas, aleaciones, óxidos y superficies de carbono.

Explotar las capacidades de los métodos computacionales para predecir tendencias, guiar experimentos y para identificar materiales promisorios para el almacenamiento de hidrógeno, resistencia a la fragilización y catálisis, producción de energía fotovoltaica y reactividad en biodiesel.

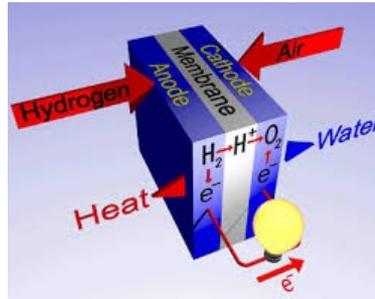
Entre los objetivos se incluye también el estudio teórico de materiales para cátodos y ánodos para celdas de combustible que sean tolerantes a las impurezas y donde se reemplace a los metales preciosos y tierras raras en su fabricación. Finalmente se exploran las propiedades de compuestos de carbono decorados con metales de transición e hidruros metálicos para el almacenamiento de hidrógeno.

# Áreas de investigación

## Catálisis



## Celdas combustibles



Modelos para  
cátodos y ánodos

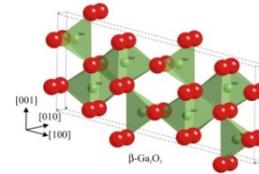
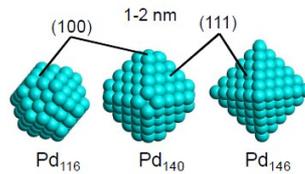
## Alimentos



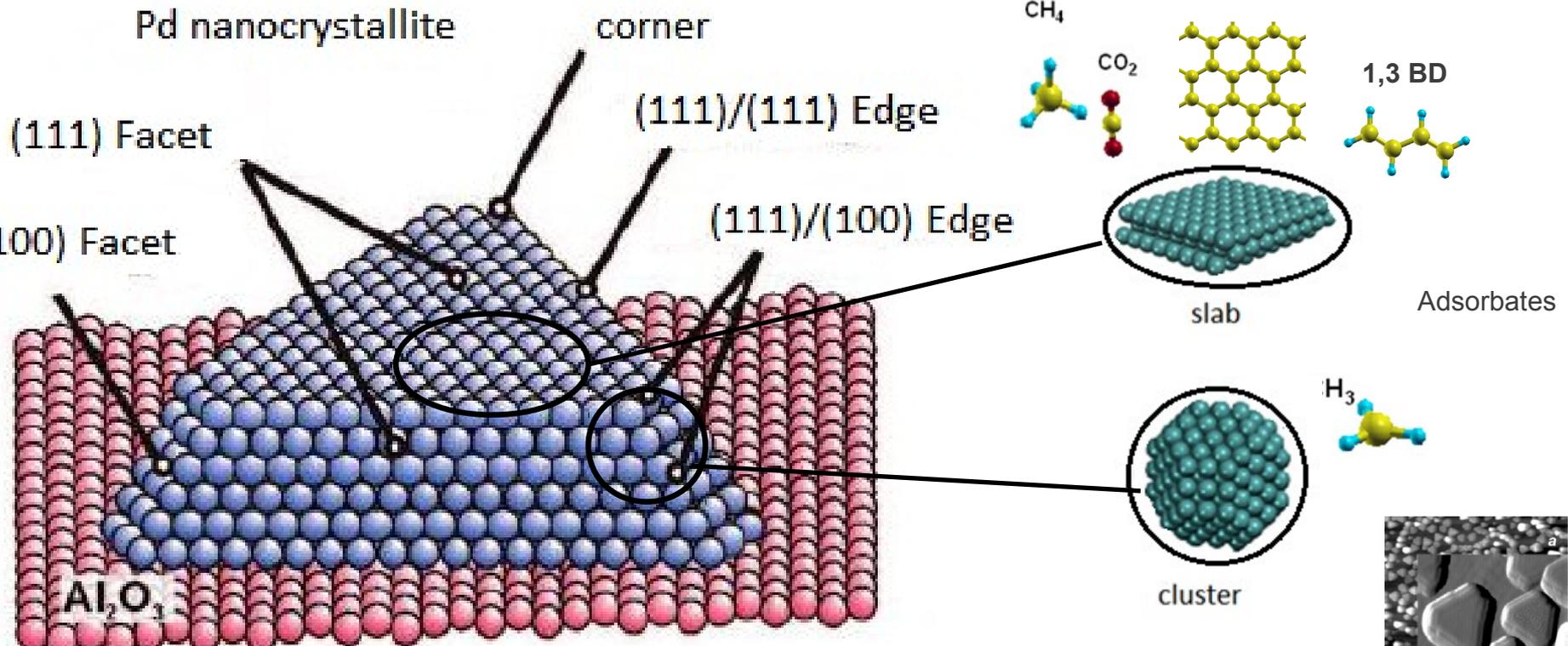
Modelos de  
catalizadores para  
evitar la formación  
de grasas *trans*

# Sistemas de interés en catálisis

## Metales



## Óxidos



Support model: Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>

Support effects: interactions  
metal-support

Particle size – Structure dependent  
effects

# Catálisis

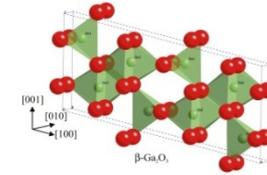


## Metales

- ❑ Adsorción de átomos (H, C), moléculas (hidrocarburos, CO, CO<sub>2</sub>, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, fosfatos, NO<sub>2</sub>) sobre metales de transición (Pd, Cu, Ag, Au, Ni).
- ❑ Estudio de diferentes propiedades en bimetálicos (Pd/Ni, Pt/Ni).
- ❑ Intermetálicos PdGa, superficies (100), (111) sin y con H, (110) con CO.
- ❑ Sistema Se/Fe, Se/FeSiAl(110).
- ❑ Hidruro de Mg (MgH<sub>2</sub>) dopado con Nb
- ❑ Estudio de aleaciones Pt-Co; adsorción de benceno y CO
- ❑ Defectos (vacancias, impurezas).
- ❑ Formación de grafeno. Nanotubos funcionalizados con metales (Rh)

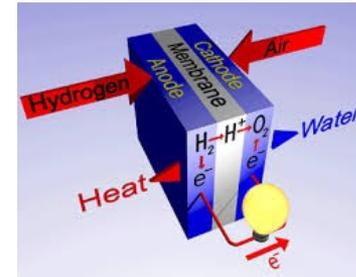
# Catálisis

## Óxidos

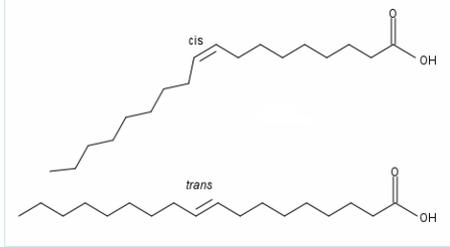


- Goetita ( $\alpha$ -FeO(OH)), bulk, rica en Al y superficie (110). Adsorción de SO<sub>2</sub>.
- Titania (TiO<sub>2</sub>), diferentes polimorfos (rutilo, anatasa), bulk estequiométrica, reducida, con dopados aniónicos y metálicos. Superficies (100), (101), (110). Adsorción de H<sub>2</sub>O, CO.
- MgO; reacción de glicerólisis de oleato de metilo.
- BaO.
- Ceria (CeO<sub>2</sub>)

# Celdas combustibles



Estudio teórico de materiales para cátodos y ánodos, para celdas de combustible que sean tolerantes a las impurezas y donde se reemplace a los metales preciosos y tierras raras en su fabricación.



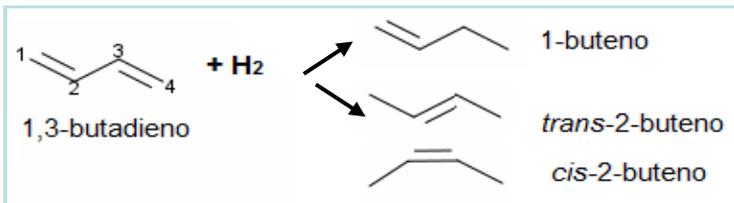
# Alimento S



Los ácidos grasos *trans* de producción industrial (“grasas *trans*”) han sido definidos como "ácidos grasos insaturados que contienen uno o varios enlaces dobles en una configuración *trans*".

Se forman durante la hidrogenación parcial de aceites vegetales líquidos para formar grasas semisólidas que se emplean en margarinas, aceites para cocinar y muchos alimentos procesados (panificación, pastelería, galletitas).

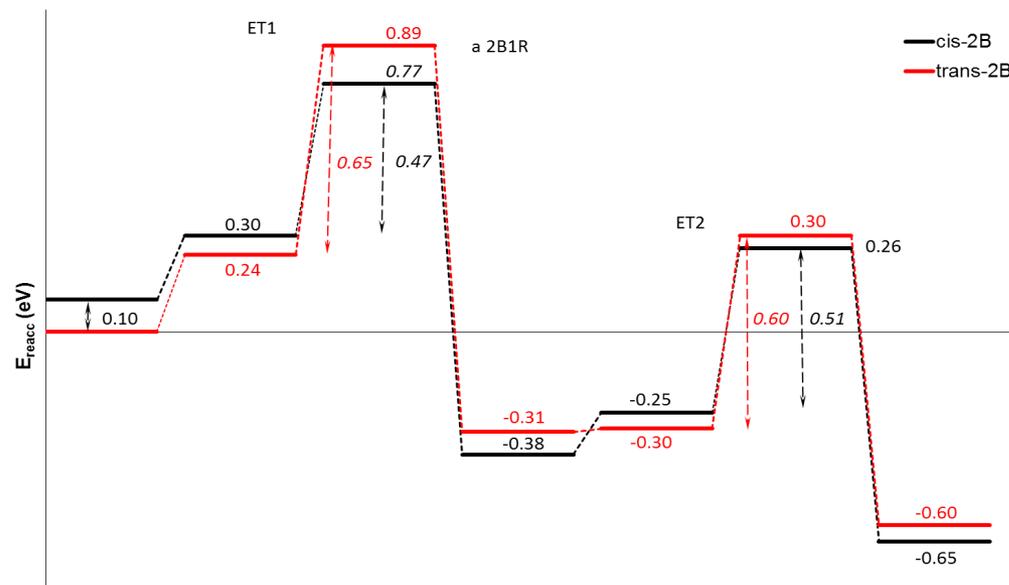
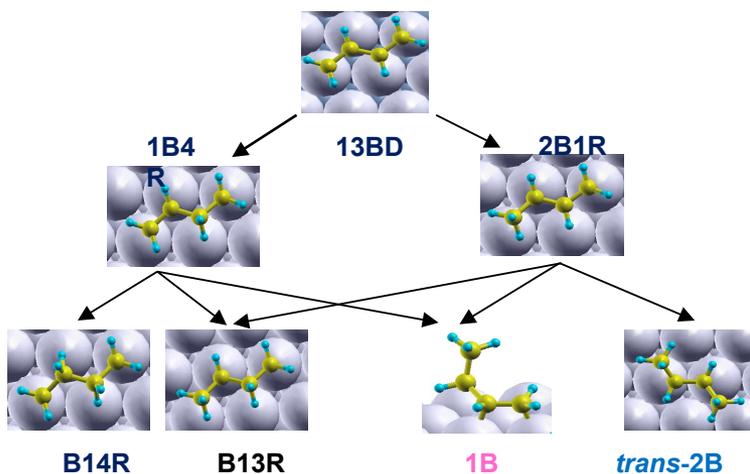
Estudio de la hidrogenación parcial del 1,3 butadieno sobre sistemas bimetálicos Pd<sub>n</sub>/Ni<sub>m</sub> (n,m = 0-4, n+m = 4) (NEB).



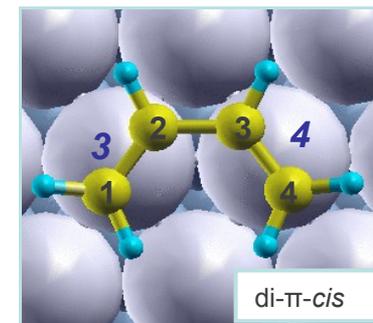
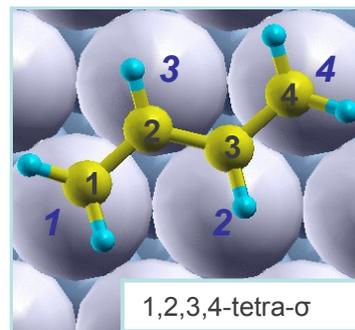
# Alimentos



## Mecanismo Horiuti-Polanyi



Modos de adsorción	$E_{\text{ads}}$ (eV)
di- $\pi$ - <i>cis</i>	-0.42
di- $\pi$ - <i>trans</i>	-0.44
1,2,3,4-tetra- $\sigma$	-0.52

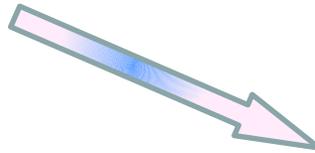


# Facilidades computacionales

Grumastica



Varias PC



Dos clusters (CCT-CONICET): uno de 16 nodos de 4 cores cada uno (64 cores) y otro de 2 nodos de 2 cores (4 cores).

Otro cluster (UNS) compuesto de un Front End y 8 nodos de 32 GB de RAM y 12 cores cada uno con procesadores XEON (totalizando 96 cores).

# Facilidades computacionales

Grupo Dr. Juan



Server con 32 GB de RAM con 2 procesadores Xeon de 6 core cada uno (12 núcleos).



6 PC procesador i7 y una con procesador i5.

# Facilidades computacionales

IFISUR



**Cluster** ihpc01.ifisur-conicet.gob.ar. El mismo pretende ser un una herramienta de trabajo para el centro de investigación formado por científicos del instituto, y ser un centro de servicios de supercomputación para toda la comunidad científica y estudiantil.

El cluster es de propósito específico, implementado sobre el paradigma Beowulf, está constituido por servidores de arquitectura XEON, y los nodos de cálculos poseen cada uno de ellos las siguientes especificaciones:

2 procesadores Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 0 @ 2.00GHz.

24 GB de memoria principal.

500 GB SATA de almacenamiento local.

El conjunto de 72 nodos, resultante, está conectado a Internet mediante una conexión LAN de 1Gb Ethernet a través de CRIBA, CONICET, Bahía Blanca.

Algunas de las características software disponible inicialmente son: Sistema operativo multiusuario, multitarea Linux.

# Gracias por su atención!

