



IfiSur
Instituto de física del sur



“Bahía: una nanopartícula con muchas propiedades”

Gabriela F. Cabeza
gcabeza@uns.edu.ar

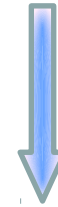
Departamento de Física - UNS
IFISUR - CONICET
Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos
(GRUMASICA)
Bahía Blanca



¿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.

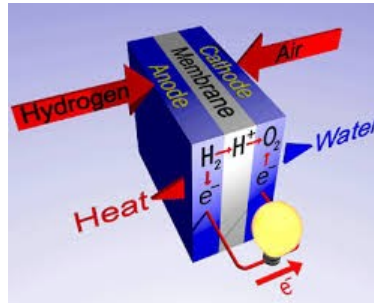
Entre los objetivos se incluye también el estudio teórico de materiales para cátodos y ánodos para celdas de combustible que sean tolerantes a las impurezas y donde se reemplace a los metales preciosos y tierras raras en su fabricación. Finalmente se exploran las propiedades de compuestos de carbono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

Áreas de investigación

Catálisis



Celdas combustibles



Modelos para
cátodos y ánodos

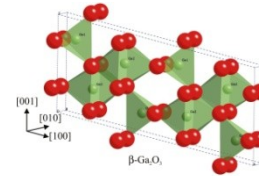
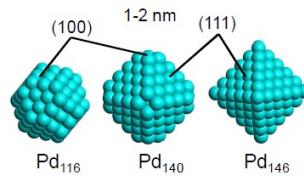
Alimentos



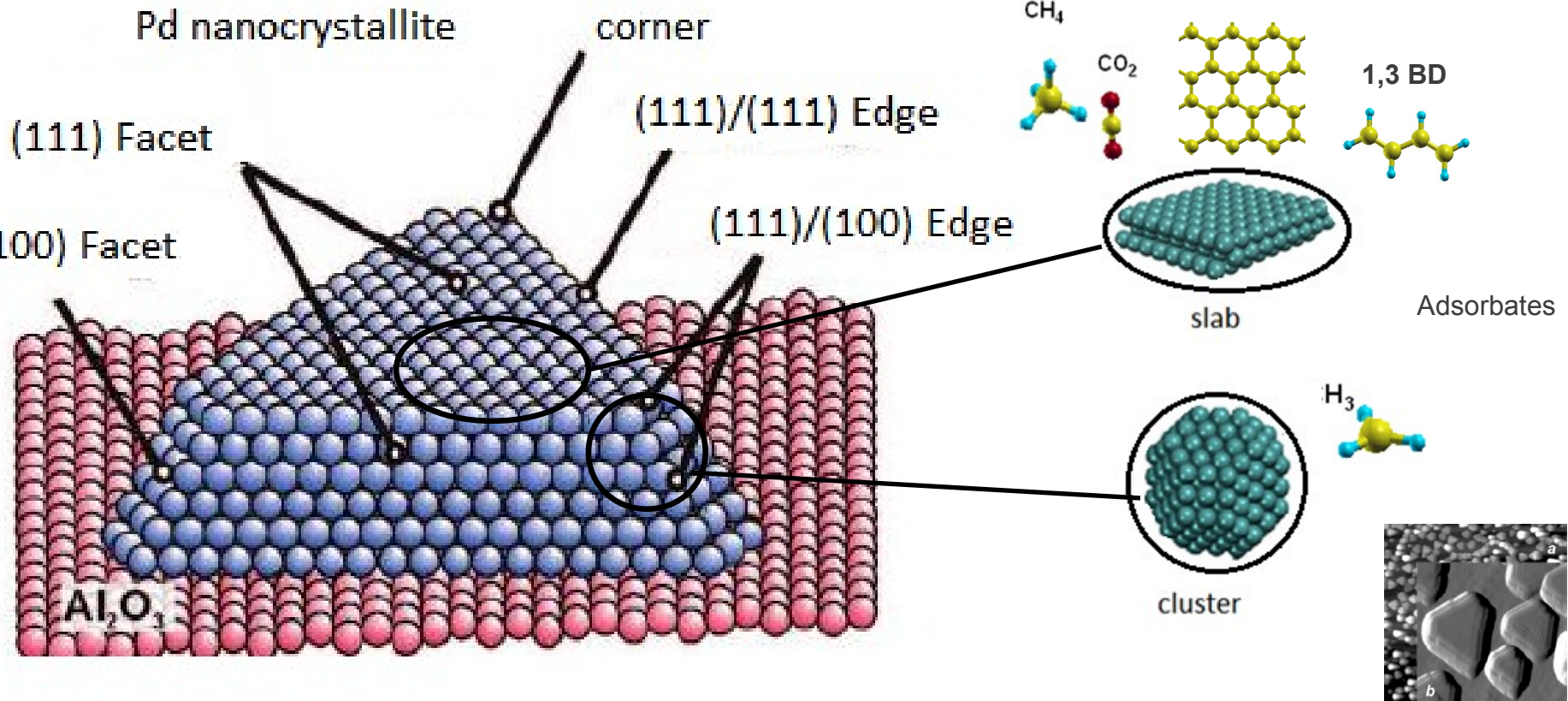
Modelos de
catalizadores para
evitar la formación
de grasas *trans*

Sistemas de interés en catálisis

Metales



Óxidos



Support model: Al₂O₃, TiO₂

Support effects: interactions
metal-support

Particle size – Structure dependent
effects

Catálisis

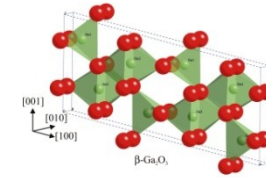


Metales

- ❑ Adsorción de átomos (H, C), moléculas (hidrocarburos, CO, CO₂, CH, CH₂, CH₃, fosfatos, NO₂) 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 (MgH₂) dopado con Nb
- ❑ Estudio de aleaciones Pt-Co; adsorción de benceno y CO
- ❑ Defectos (vacancias, impurezas).
- ❑ Formación de grafeno. Nanotubos funcionalizados con metales (Rh)

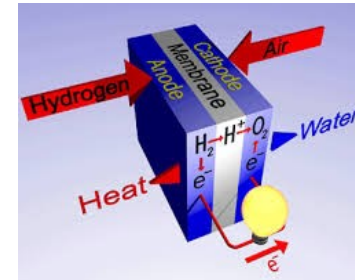
Catálisis

Óxidos

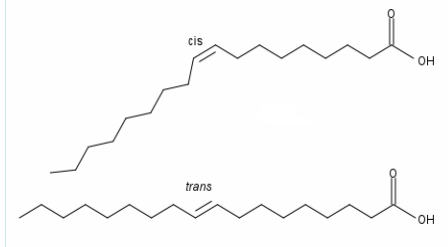


- Goetita ($\alpha\text{-FeO(OH)}$), bulk, rica en Al y superficie (110). Adsorción de SO_2 .
- Titania (TiO_2), diferentes polimorfos (rutilo, anatasa), bulk estequiométrica, reducida, con dopados aniónicos y metálicos. Superficies (100), (101), (110). Adsorción de H_2O , CO .
- MgO ; reacción de glicerólisis de oleato de metilo.
- BaO .
- Ceria (CeO_2)

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.



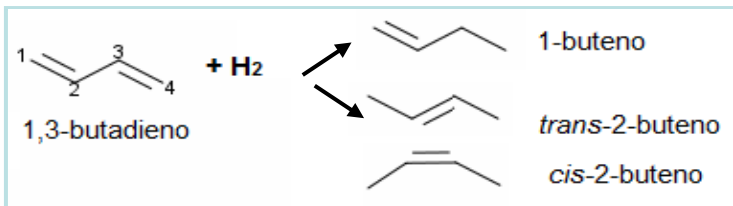
Alimento S



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).

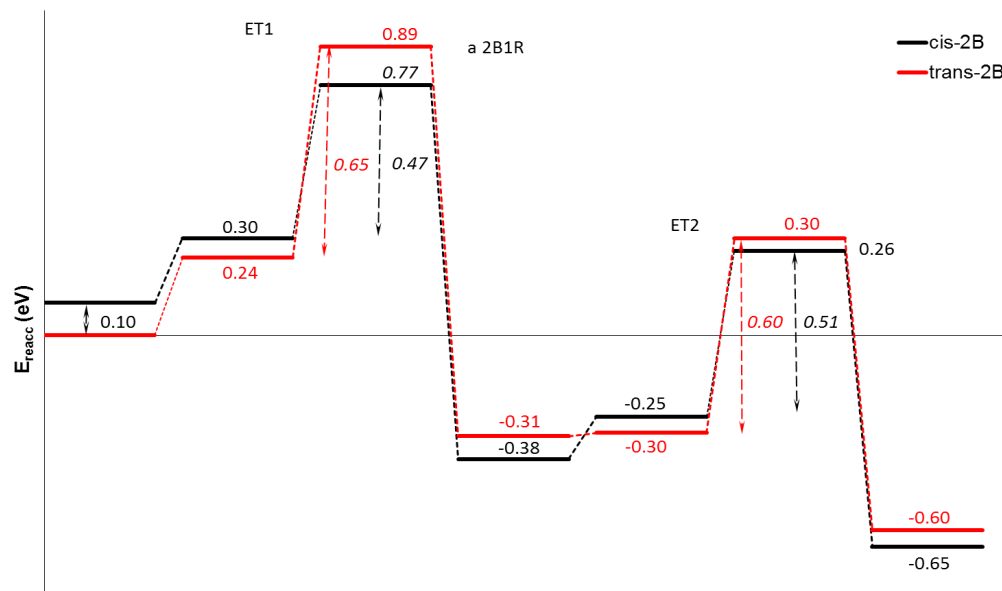
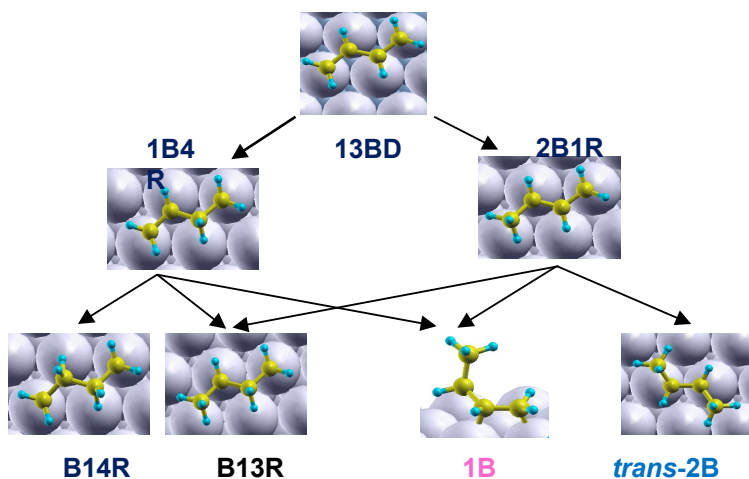
Estudio de la hidrogenación parcial del 1,3 butadieno sobre sistemas bimetálicos Pd_n/Ni_m (n,m = 0-4, n+m = 4) (NEB).



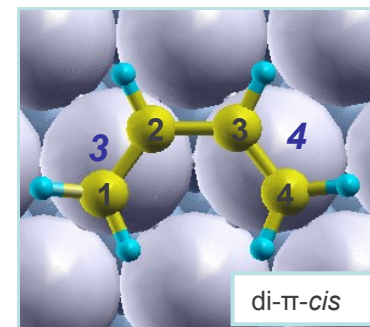
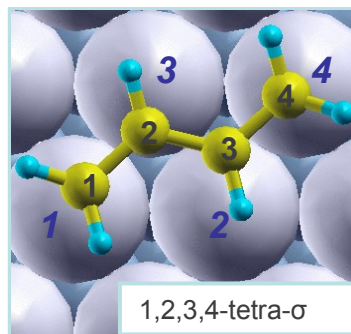
Alimentos



Mecanismo Horiuti-Polanyi



| Modos de adsorción | E _{ads} (eV) |
|--------------------------|-----------------------|
| di- π - <i>cis</i> | -0.42 |
| di- π - <i>trans</i> | -0.44 |
| 1,2,3,4-tetra- σ | -0.52 |

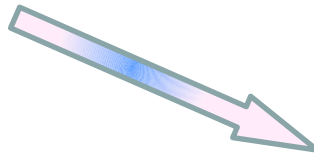


Facilidades computacionales

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).

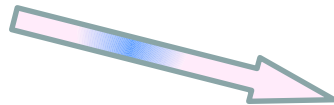
Otro cluster (UNS) compuesto de un Front End y 8 nodos de 32 GB de RAM y 12 cores cada uno con procesadores XEON (totalizando 96 cores).

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!

