

Materia Condensada

Martes 26 de septiembre

Centro Cultural Pasaje Dardo Rocha

Polivalente

14:00 - Estudio del orden magnético de un monocristal de $\text{CaBaCo}_4\text{O}_7$

Larralde A¹, Pomjakushina E², Zaharko O², Kenzelmann M², Curiale J^{3 4}, Aurelio G⁵, Sánchez R^{3 4}

¹ Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica

² Paul Scherrer Institut

³ Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo

⁴ Laboratorio de Resonancias Magnéticas, Centro Atómico Bariloche, Gerencia de Física, CNEA.

⁵ CONICET - CCT Patagonia Norte

El óxido RBaCo_4O_7 , con $\text{R}=\text{Ca}$ (CBCO-114), es un novedoso compuesto magnetoeléctrico con el mayor valor de polarización ferroeléctrica inducida por orden magnético reportado en los últimos años (17 mC/m^2) [1]. Este compuesto pertenece a una familia de óxidos que presentan propiedades eléctricas y magnéticas excepcionales, y que involucran frustración magnética en un arreglo tridimensional de tetraedros de Co. Las cobaltitas CBCO-114 cristalizan en el grupo espacial polar $Pbn2_1$ que permite la existencia de una polarización eléctrica a lo largo de la dirección c . No se han reportado transiciones estructurales de este compuesto en el rango de temperaturas entre 4 y 293 K, y se cree además, que el óxido posee orden de carga.

La evolución del orden magnético en función de la temperatura, es un tema que merece ser abordado. A pesar del arreglo de átomos de Co en celdas de geometría triangular y kagomé, que típicamente generan estados magnéticos frustrados, aparecen distorsiones ortorrómbicas que permiten el desarrollo de orden magnético a largo alcance.

Si bien a partir de estudios de Difracción de Neutrones de Polvo (NPD), se determinó que el orden de baja temperatura corresponde a una fase ferrimagnética que involucra un arreglo no colinear de espines, esta estructura no ha sido aún corroborada por mediciones en monocristales, un método mucho más sensible para este tipo de sistemas con un orden tan complejo. Otro aspecto que ha sido poco explorado es la presencia de correlaciones antiferromagnéticas, que podrían manifestarse en correlaciones de corto alcance a temperaturas intermedias, y que ha sido observado por nuestro grupo utilizando NPD en compuestos ligeramente sustituidos con Sr, así como en otros compuestos relacionados. La ventaja de estudiar monocristales es que nos permiten determinar la presencia y naturaleza de este orden de corto alcance y su relación con

la estructura magnética reportada.

En este trabajo reportamos un estudio realizado en colaboración con el grupo de Física del Estado Sólido del Paul Scherrer Institut (PSI) en Suiza, donde logramos crecer un monocristal de CBCO-114 utilizando un horno de zona flotante.

Se investigó la estructura cristalina y magnética de este monocristal utilizando la facilidad ZEBRA (Single Crystal Neutron Diffraction Instrument) en PSI. Se realizaron mediciones en el estado magnéticamente ordenado a baja temperatura (11 ± 2) K y en la zona paramagnética (100 ± 2) K.

Se reportan también estudios de magnetización en función de la temperatura en la dirección *a* de este monocristal y el análisis mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC) a alta temperatura. Estas últimas determinaciones no habían sido reportadas hasta la fecha.

Nuestro trabajo confirma que la familia de compuestos 114 tiene alto potencial para el diseño de materiales magnetoeléctricos.

[1]. V Caignaert et al, Phys. Rev. B 88 (2013) 174403.

14:20 - Orden magnético en la ferrita de Zn. Una respuesta a partir de métodos de primeros principios, un modelo de espines clásico y simulaciones Montecarlo

Melo Quintero J J¹, Rosales D¹, Gómez Albarracín F¹, Matera M¹, Rodríguez Torres C E¹, Errico L^{1 2}

¹ Departamento de Física e Instituto de Física La Plata (IFLP, CCT La Plata, CONICET-UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CC 67, 1900 La Plata, Argentina

² Universidad Nacional del Noroeste de la Pcia. de Bueno Aires (UNNOBA), Monteagudo 2772, (2700) Pergamino, Argentina

Las espinelas comprenden un grupo muy importante de compuestos con una amplia variedad de propiedades. Las espinelas cristalizan en una estructura cúbica centrada en las caras con empaquetamiento compacto y se caracterizan por su arreglo atómico de dos sitios para los cationes: sitios A (coordinación tetraédrica de oxígeno) y sitios B (coordinación octaédrica de oxígeno). Se pueden distinguir dos tipos básicos de espinelas, las normales y las invertidas. En el primer caso, los iones M ocupan el sitio A y los X el sitio B. Las espinelas invertidas se describen por la fórmula $XM\text{XO}_4$. En este caso los iones M y X ocupan los sitios B en igual proporción. Existen también casos de inversión parcial.

Dentro del conjunto de espinelas, las ferritas ($M\text{Fe}_2\text{O}_4$) son una de las familias de materiales magnéticos más ampliamente estudiados debido al interés tanto básico como aplicado que despiertan. En particular, la ferrita de Zn (ZnFe_2O_4 , ZFO) es semiconductor con un gap del orden de 2 eV y es un material paramagnético que presenta acoplamiento antiferromagnético para temperaturas menores a 10.5 K. Es-

trictamente, la ZFO normal es un sistema frustrado y el orden magnético no se logra aún a temperaturas tan bajas como 1.5 K. El acoplamiento magnético en estos sistemas es de superintercambio entre los cationes metálicos vía los átomos de oxígeno de la estructura dando como resultado acoplamientos A-O-A, B-O-B y A-O-B (A y B representan los sitios estructurales). En el caso particular de ZFO volumétrica y normal se presentan sólo interacciones B-O-B ya que los átomos de Zn no presentan polarización de espín. Este acoplamiento entre Fe es muy débil, como lo refleja la baja temperatura de orden. Resultados experimentales muestran que las propiedades magnéticas de las ferritas y de ZFO en particular dependen de la distribución de cationes en la red. Dependiendo del método de preparación y cuando el tamaño de partícula es reducido a la nanoescala, se ha encontrado que se favorece la inversión catiónica, dando lugar a interacciones A-O-B, las cuales son mucho ms fuertes que la B-O-B, favoreciendo así la interacción magnética.

A fin de estudiar en profundidad el orden magnético de ZFO y como depende el mismo de defectos como inversión catiónica, presentamos un estudio basado en cálculos de primeros principios y simulaciones Monte Carlo Metropolis cuyo objetivo fue obtener la configuración magnética de equilibrio de la ferrita de Zn. Mediante los cálculos basados en primeros principios se determinaron las constantes de intercambio en el marco de un sistema de espines clásicos (Heisenberg) hasta quintos vecinos. A partir de las constantes de intercambio obtenidas, se realizaron simulaciones de Monte Carlo y se obtuvieron las curvas de susceptibilidad, las cuales son comparadas con resultados experimentales reportados en la literatura. Presentamos las características de los órdenes a baja temperatura obtenidos con los diferentes acoplamientos propuestos y una metodología para obtener los valores de las constantes de acoplamiento. Nuestros resultados se comparan con modelos de moléculas de espín para el estado fundamental de ZFO a bajas temperaturas propuestos en la literatura.

14:40 - Síntesis de un coloide Fe/Fe₃O₄@CitNa, estable y de alta respuesta magnética, por mecanoquímica y coprecipitación, para potenciales aplicaciones en hipertermia magnética

Muñoz Medina G A¹, Sánchez F², Fernández van Raap M²

¹ Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata

² Instituto de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata

En este trabajo se presenta una ruta de síntesis para el sistema core-shell (Fe/Fe₃O₄@CitNa) para potenciales aplicaciones en terapias oncológicas. El sistema Fe/Fe₃O₄@CitNa presenta una alta magnetización de saturación (Ms) debido a su núcleo de hierro, al cual se lo dota de biocompatibilidad con el recubrimiento de magnetita (Fe₃O₄) [1]. La obtención del núcleo de Fe se realizó por mecano-síntesis a partir de FeCl₃, Mg y NaCl, este último sirve como dispersante en una reacción fuertemente exotérmica. El proceso es una variación de la ruta reportada por McCormick et. al.

[2-3]. Posteriormente, se crece un recubrimiento de Fe_3O_4 por coprecipitación asistida por ultrasonido [4], y finalmente el coloide en fase acuosa es estabilizado electrostáticamente con citrato de sodio (CitNa).

El estudio de las condiciones más promisorias para la obtención del núcleo de Fe fue realizado en el molino oscilatorio Retsch 2000. Para ello se estudió el efecto de la variación estequiométrica del Mg (0.90, 0.95 y 1.00) en atmósfera de argón, 6 horas de molienda y relación de masas de reactivos - esferas de 1:15.62. Los polvos obtenidos se estudiaron por espectroscopia Mössbauer (EM), magnetometría de muestra vibrante (VSM) y difracción de rayos X (DRX). A partir de las condiciones obtenidas, se escaló el proceso en el molino planetario Pulverisette 7 en el cual se pudo obtener hasta 16 veces la masa de nanopartículas de Fe obtenida con el modelo Retsch 2000. En esta etapa se estudió el efecto de la variación de la relación de masas y tiempo de molienda sobre las propiedades finales del núcleo. Por último, se creció una capa nanométrica de Fe_3O_4 y se usó citrato de sodio para obtener un coloide estable de $\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{CitNa}$. El coloide obtenido fue caracterizado por TEM, potencial Z, VSM, SQUID y SAXS. También se realizó un estudio calorimétrico de la velocidad específica de absorción (SAR) de energía electromagnética variando la amplitud de un campo magnético con una frecuencia de 267 kHz basándose en la Ref. [5]. A partir del mismo se obtuvieron valores de SAR cercanos a los 500 W/gFe en muestras puras y de aproximadamente 1 kW/gFe en muestras diluidas, para una amplitud de campo de 57.2 kA/m y una concentración nominal entre los 2 - 3 gFe/mL en todos los coloides.

[1]. H. Markides, M. Rotherham, A. J. ElHaj. Biocompatibility and Toxicity of Magnetic Nanoparticles in Regenerative Medicine. *Journal of Nanomaterials*. Vol: 2012. Págs. 11. 2012.

[2]. J. Ding, W. F. Miao, P. G. McCormick, R. Street. ?Mechanochemical synthesis of ultrafine Fe powder?. *Applied Physics Letters*. Volume 67. 1995.

[3]. P. G. McCormick, T. Tsuzuki, J. S. Robinson, J. Ding. Nanopowders Synthesized by mechanochemical Processing. *Advanced Materials*. Volume 13. 2001.

[4]. S. E. Jacobo, P. G. Bercoff, C. A. Herme, L. A. Vives. Sr hexaferrite/Ni ferrite nanocomposites: Magnetic behavior and microwave absorbing properties in the X-band. *Materials Chemistry and Physics*. Volume 157. Págs: 124 - 129. 2015.

[5]. M. B. Fernández van Raap, D. F. Coral, S. Yu, G. A. Muñoz, F. H. Sánchez, A. Roig. Anticipating hyperthermic efficiency of magnetic colloids using a semi-empirical model: a tool to help medical decisions. *Phys.Chem.Chem.Phys*. 2017. 19. 7176.

15:00 - Superconductores basados en Fe y en Bi: dependencia con temperatura y dopaje de las propiedades espectrales y la superficie de Fermi

Ventura C I^{1,2}, Querales Flores J D^{3,1}, Citro R⁴, Rodríguez Núñez J J⁵

¹ Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica

² Universidad Nacional de Río Negro

³ Tyndall National Institute, University College Cork, Irlanda.

⁴ Dipartimento di Fisica .E. R. Caianiello Università degli Studi di Salerno, Italia

⁵ Universidad Carabobo, Valencia, Venezuela

Para dos familias de superconductores no convencionales, como los basados en Fe

descubiertos en 2008 y los superconductores con planos de BiS₂ descubiertos en 2012, investigamos los efectos del dopaje y la temperatura sobre las propiedades espectrales del estado normal y la topología de la superficie de Fermi. Para describir el estado normal paramagnético de los ferropnictidos superconductores empleamos un modelo con dos orbitales efectivos correlacionados. [1] Calculamos las funciones de Green electrónicas dependientes de temperatura, y en particular la función densidad espectral, con un tratamiento perturbativo para desacoplar las ecuaciones de movimiento, apropiado para las correlaciones electrónicas intermedias en estos materiales. Con la renormalización por correlaciones dada por la autoenergía obtenida (con dependencia del momento cristalino, dopaje y temperatura), pudimos describir las características del estado normal evidenciadas por experimentos de ARPES (fotoemisión con resolución angular), y en particular los corrimientos de potencial químico en función del dopaje medidos en ferropnictidos, obteniéndolos con el orden de magnitud correcto a diferencia de los cálculos LDA (aproximación de densidad local para la teoría de funcional densidad). También pudimos describir la dependencia con momento hallada en ARPES para la densidad espectral a lo largo del trayecto Γ -X de la 1ra zona de Brillouin, y las características principales medidas a lo largo de Γ -M. Además, realizamos predicciones de un comportamiento anómalo con temperatura para la densidad espectral y la densidad de estados, vinculado a contribuciones correspondientes a momentos cristalinos de regiones de la 1ra zona de Brillouin aún no explorados con ARPES. [1] Más recientemente, hicimos predicciones para las propiedades espectrales de los nuevos compuestos superconductores con planos de BiS₂. [2] Para los superconductores basados en Fe y Bi estudiamos también los efectos de temperatura y dopaje sobre la topología de la superficie de Fermi, encontrando varias transiciones de Lifshitz para los ferropnictidos en función del dopaje, mientras que en bismutatos la transición topológica de la superficie de Fermi obtenida para un valor crítico de dopaje resulta independiente de temperatura.

[1]. J. Querales, C. I. Ventura, R. Citro y J. J. Rodríguez Núñez, Phys. Lett. A 380, 1648-1657 (2016)

[2]. J. Querales, C. I. Ventura, R. Citro y J. J. Rodríguez Núñez, Phys. B 488, 32-42 (2016).

15:20 - Estudio teórico-experimental del HER en superficies escalonadas de Ag

Ávila M¹, Juárez M F², Ruderman A¹, Santos E^{1 2}, Leiva E P M³, Oviedo O A³

¹ Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC

² Institut für Theoretische Chemie - Universität Ulm

³ Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC

La reacción de evolución del hidrógeno (HER - Hydrogen Evolution Reaction) y

la adsorción del mismo sobre superficies metálicas, son dos de los procesos electroquímicos más estudiados en la actualidad. Esto está motivado por dos razones: por un interés tecnológico en usar H como vector de energía y por un interés teórico ya que es considerada como un prototipo clásico de un proceso electrocatalítico.

La velocidad de la HER depende fuertemente de la estructura morfológica de las superficies. En este sentido, el uso de superficies escalonadas sea posicionado como uno de los métodos con mayor perspectiva para estudiar las propiedades catalíticas de diferentes reacciones, ya que permite analizar de forma sistemática estas, variando de forma bien definidas el tamaño relativo de las terrazas y escalones.

En trabajos previos [1,2] se determinaron las condiciones experimentales para la HER sobre Ag (potencial de electrodo y temperatura) y los valores de las constantes de velocidad (Volmer y Heyrovsky) en esas mismas condiciones. Por otro lado, en Referencia [3] se determinaron, a nivel de DFT, las energías de adsorción de H en diferentes sitios, siendo la más favorable la de los escalones. A partir de estos trabajos, se visualizan dos escenarios posibles, el macroscópico (experimental) y el microscópico (teoría), siendo una pregunta: ¿cómo se vinculan ambos mundos? al intentar responder esta pregunta, notamos que las simulaciones cobran real importancia.

En el presente trabajo se presentará un modelo cinético [4] que intenta conectar ambos escenarios antes mencionado. El modelo será ejemplificado analizando la HER en electrodos de Ag(11n) buscando reproducir datos experimentales, utilizando información microscópica dentro de un esquema de Monte Carlo Cinético (KMC). La correspondencia obtenida entre las simulaciones y los datos experimentales impulsados por un tratamiento teórico adecuado, sugiere que el modelo propuesto captura los aspectos esenciales del HER en superficies de Ag.

[1]. A. Ruderman, *et al*, Current transients for the hydrogen evolution reaction at high overpotentials on silver electrodes in acid solutions: Experiments and modelling, *Electrochim. Acta* **109** (2013)

[2]. A. Ruderman, *et al*, First insights of the electrocatalytical properties of stepped silver electrodes for the hydrogen evolution reaction, *Electrochem. Commun.* **34** (2013)

[3]. M.F. Juárez, E. Santos, Electronic Anisotropy at Vicinal Ag(11n) Surfaces: Energetics of Hydrogen Adsorption, *J. Phys. Chem. C* **120** (2016)

[4]. M. F. Juárez, *et al*, Hydrogen Evolution Reaction on Nanostructures Electrodes - a Scenario on Stepped Silver Surface, *Electrocatalysis* (2017)

15:40 - Difusión superficial y crecimiento. C60 sobre Cu(111)Ruano G¹, DeMiguel J J², Ferrón J¹¹ Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET)² Universidad Autónoma de Madrid

La difusión superficial es probablemente el fenómeno más influyente a escala atómica en el crecimiento epitaxial. El crecimiento involucra la difusión superficial, la nucleación en los bordes de las islas o de los escalones de las terrazas y el salto a través de estos escalones. En este contexto, uno está tentado a pensar que el crecimiento será mejor para mayores longitudes de difusión (menores barreras). Si bien esto es cierto en el régimen conocido como "step flow", en el cual los átomos sólo nuclean en los bordes de terrazas, no lo es para condiciones normales de crecimiento en las cuales la formación de islas es común. El caso de crecimiento homo-epitaxial de Cu sobre Cu(100) y Cu(111) es un buen ejemplo en el que crecimiento capa a capa (LbL) se da en el caso de la superficie con mayor barrera de difusión: Cu(100). Esto es debido a la relación entre la difusión superficial y el salto en los escalones (barrera de Erlich-Schwoebel) y los diferentes mecanismos de difusión en ambos casos, intercambio atómico en la cara (100) y jumping en la 111).

En este trabajo presentamos resultados, basados en espectroscopia de electrones Auger (AES) y simulaciones de dinámica molecular (MD), sobre la difusión de C60 sobre Cu(111). Este sistema presenta un par de condiciones que lo hacen muy interesante. En primer lugar, la molécula de C60 es tridimensional e incorpora la posibilidad de rotación, un nuevo mecanismo de difusión respecto de la difusión atómica o de islas. El otro punto interesante es la gran diferencia en las barreras de difusión, un orden de magnitud, entre el C60 sobre Cu(111) y sobre C(60). Con estos parámetros uno posee 2 sistemas claramente diferentes entre el crecimiento en la primera capa respecto de la segunda, y nuestra predicción es que el crecimiento debe ser en tres dimensiones.

Nuestros resultados experimentales (AES) muestran que el crecimiento de C60 sobre Cu(111) es capa a capa hasta la tercera capa (límite de la espectroscopia). Los resultados de MD para C60 sobre Cu(111) muestran 2 regímenes diferentes de difusión, uno a baja temperatura con un carácter aleatorio (desplazamiento proporcional a raíz de t) y a temperaturas mayores con una evolución determinística (desplazamiento proporcional a t), para tiempos pequeños, recuperando el carácter aleatorio para valores mayores. Para C60 sobre C60 la difusión es siempre de carácter aleatorio.

Miércoles 27 de septiembre

Centro Cultural Pasaje Dardo Rocha

Polivalente

ME: charla en común con la división de Mecánica estadística, física no lineal y sistemas complejos

14:00 - Localización de Anderson en la transición de desanclaje

Kolton A B¹

¹ *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*

La línea de contacto de una gota sobre una superficie rugosa, vórtices en un superconductor, una pared de dominio en un material ferromagnético o ferroeléctrico, una fractura o un sólido amorfo bajo tensión, dos sólidos o placas tectónicas friccionando, son algunos ejemplos de sistemas que logran deslizar sólo por encima de un umbral finito de forzamiento donde ocurre una transición de desanclaje, caracterizada por la ocurrencia de intermitencia con grandes avalanchas de actividad o ¿terremotos? cuando nos acercamos a la misma. Por otro lado, el fenómeno de localización de Anderson es usualmente asociado al comportamiento, en un potencial desordenado, de partículas de tamaño subatómico o atómico, donde rige la mecánica cuántica. En esta charla les mostraré la (sorpresa) conexión que encontramos [1] recientemente entre estos dos problemas, para el caso paradigmático del desanclaje de interfaces elásticas en medios desordenados.

[1]. X. Cao, S. Bouzat, A. Rosso, A. B. Kolton, en preparación.

14:20 - (ME) Propiedades de la transición plástica de sólidos amorfos

Fernández Aguirre I¹, Jagla E^{1 2}

¹ *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo - Comisión Nacional de Energía Atómica*

² *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*

La transición plástica de un sólido amorfo es el paso entre un estado rígido (cuando la tensión de corte aplicada es pequeña), a un estado en que el sistema fluye de manera continua (cuando la tensión supera un valor crítico).

El modelado de los sólidos amorfos y el entendimiento de su transición plástica es actualmente un tema de mucho interés. Diversos trabajos [1-3] han utilizado modelos mesoscópicos para el estudio de esta transición con resultados que reproducen una buena cantidad de observaciones experimentales. Sin embargo, no es claro aun si los exponentes críticos de la transición son universales, o dependen de ciertos detalles del sistema.

En este trabajo se estudia la transición de plasticidad de un sólido amorfo bidimensional bajo la acción de una tensión de corte. Mostramos que en estas condiciones es

posible la utilización de un modelo escalar [3] para analizar el proceso. Este modelo combina la descripción de las interacciones elásticas con la posibilidad de reacomodamientos estructurales responsables del comportamiento plástico. Estos posibles reacomodamientos quedan definidos por un potencial unidimensional, el cual se elige de manera aleatoria en distintos puntos de la muestra para dar cuenta de las heterogeneidades locales.

El modelo predice comportamientos cualitativamente similares a los observados previamente [1-3]. Sin embargo es notable la dependencia observada de algunos exponentes críticos con el tipo de potencial utilizado para modelar el desorden. Ejemplo de ello es el exponente de la ley de potencia que describe el crecimiento de la tasa de deformación por encima del valor de tensión crítico, para el cual se observan dos valores posibles.

Estos resultados indican que no existe una única clase de universalidad para la transición de plasticidad de sólidos amorfos y llama a reexaminar el concepto mismo de universalidad en este caso.

[1]. Jagla, E. A., Avalanche-size distributions in mean-field plastic yielding models. *Phys. Rev. E*, **92**, 042135, 2015.

[2]. Lin, J., Lerner, E., Rosso, A., Wyart, M., Scaling description of the yielding transition in soft amorphous solids at zero temperature. *PNAS*, **111** (40), 1438214387, oct. 2014

[3]. Jagla, E. A.. Non-universalities at the yielding transition.[Preprint]. 2017 [cited 2017 Jun. 29]

14:40 - Modelo de líquido de monopolos en la red pirocloral

Slobinsky D¹ ², Borzi R A¹ ³

¹ Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET, UNLP

² Facultad Regional La Plata - Universidad Tecnológica Nacional

³ Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata

Un Líquido de monopolos es un sistema desordenado de cargas magnéticas formadas por espines de Ising en la red pirocloral con una densidad de carga estrictamente igual a uno en cada tetrahedro. En el presente trabajo definimos un Hamiltoniano modelo para este líquido de espines y comparamos sus propiedades termodinámicas con aquellas del modelo de hielo de espines – una fase análoga pero sin cargas. Encontramos que el sistema de monopolos presenta una entropía residual aún mayor que el hielo de espines, y que el sistema contiene al menos dos nuevos líquidos de espines: un líquido de espines polarizado para campos moderados en [100] y un cristal de monopolos que es un líquido de espines fragmentado.

Demostremos que un campo aplicado en la dirección [111] lleva al sistema a una transición de Kasteleyn tridimensional de un nuevo tipo donde se pueden hallar excitaciones en forma de loops de espines incluso por debajo de la temperatura de transición. Discutimos luego, cómo los diferentes tipos de estados del líquido de mo-

nopolo se pueden relacionar con experimentos y modelos previos, así como también pueden ser estabilizados por intermedio de la combinación de interacciones con campo magnético y deformaciones de la red.

15:00 - (ME) Análisis experimental del movimiento incipiente de esferas milimétricas sobre monocapas de distintos cubrimientos y rugosidades

Valenzuela Aracena K A¹, Oger L², Uñac R O¹, Ippolito I³, Vidales A M¹

¹ Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL

² Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes, Francia

³ Grupo de Medios Porosos, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires

El fenómeno de resuspensión de partículas ha dado lugar a distintos métodos de estudio que tienen en cuenta las diferentes causas asociadas al despegue de partículas de una superficie, ya sean teóricos y/o experimentales. El presente trabajo describe una serie de experimentos realizados a escala de laboratorio por el método de vibración, en los cuales se estudia el movimiento incipiente de granos esféricos de distintos tamaños depositados sobre una superficie rugosa que es puesta a vibrar verticalmente. Se depositan cuentas de vidrio o perlas de resina ABS sobre una superficie rugosa construida a partir de una monocapa desordenada de pequeñas esferas de vidrio. La superficie es sometida a vibración vertical sinusoidal a una amplitud fija realizando un barrido de frecuencias hasta lograr el desprendimiento del 50% de las cuentas de la monocapa. Cada experiencia se registró por medio de filmaciones en donde los datos obtenidos, fueron analizados por tratamiento de imágenes. Estos resultados se comparan, para cada tamaño de grano con la rugosidad de la superficie y los distintos porcentajes de cubrimiento de cada monocapa.

La obtención experimental de la frecuencia crítica, ω_c , necesaria para desprender de la superficie los granos móviles que se encuentran sobre la superficie, es crucial para determinar el comportamiento de las esferas a distintas amplitudes. Los resultados muestran que ω_c presenta un decaimiento exponencial con respecto a la amplitud, a mayor frecuencia menor amplitud de oscilación y que el principal mecanismo de resuspensión está dado por el modelo de "Rock'n Roll" propuesto por Reeks y Hall (2001).

15:20 - Inusual exceso de velocidad en el régimen de creep del movimiento de paredes de dominio magnéticas

Caballero N B¹, Fernández Aguirre I², Albornoz L J³, Kolton A B³, Rojas-Sanchez J C⁴, Collin S⁵, George J M⁴, Diaz Pardo R⁶, Judy V⁶, Bustingorry S³, Curiale J³

¹ Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica

² Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo

³ Centro Atómico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica

⁴ Unité Mixte de Physique CNRS/THALES, Université Paris Sud 11, Palaiseau Cedex, France

⁵ *Institut Jean Lamour, UMR CNRS 7198, Univ. de Lorraine, Vandoeuvre, Francia*

⁶ *Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, CNRS, Orsay, France*

El estudio del movimiento de paredes de dominio magnéticas cobra gran relevancia en la actualidad debido a sus prometedoras aplicaciones tecnológicas.

Con el objetivo de estudiar la dinámica de paredes de dominio magnéticas, mediante experimentos de microscopía magneto-óptica por efecto Kerr polar, se midieron velocidades de paredes de dominio en función del campo magnético aplicado en multicapas ferromagnéticas delgadas de [Co/Ni]. Los resultados obtenidos a campos magnéticos bajos son compatibles con el régimen de reptación (creep), donde la velocidad crece exponencialmente con el campo magnético. Sin embargo, a campos altos se observa un inusual exceso de velocidad, donde el comportamiento se aparta del crecimiento exponencial esperado. Las velocidades obtenidas a campos altos, pueden ser entendidas a partir de la extensión del régimen de reptación considerando una contribución extra a la velocidad debida a la dependencia del desplazamiento de la pared con el campo magnético cerca del campo de depinning.

El modelo propuesto describe muy bien tanto el régimen de creep como el atípico comportamiento observado en los experimentos realizados, y en otros experimentos reportados previamente. Además, permite obtener valores característicos para el campo de depinning, la temperatura de depinning y la escala típica de velocidades para cada muestra.

15:40 - (ME) Caracterización de materiales nanoporosos mediante procesamiento de imágenes TEM

Castillo M L¹, Cornette V², Yelpe V², Lopez R²

¹ *Departamento de Física - Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales Universidad Nacional de San Luis*

² *Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL*

El estudio y diseño de nuevos materiales, con propiedades específicas, es de interés en muchos campos de la ciencia y aplicaciones tecnológicas. En los últimos años los carbones nano-estructurados han sido de interés para los investigadores debido a sus propiedades fisicoquímicas, que son de gran utilidad en aplicaciones de adsorción y catálisis. La caracterización de las propiedades estructurales de nanomateriales porosos es un tópico de gran interés, especialmente en la aplicación de estos materiales en la problemática medioambiental, por ejemplo secuestro de CO₂ y la separación de gases como CO₂/N₂, CO₂/CH₄, etc.

Una de las características físicas más importantes de un sólido poroso, en estudios de adsorción, es la distribución de tamaño de poros (PSD). El conocimiento de la PSD es particularmente importante dado que determina el tamaño de las moléculas

que pueden ser adsorbidas, selectividad en separación de gases y reacciones, etc. Esta información es tradicionalmente obtenida con métodos de adsorción tales como adsorción de N_2 y Ar. Para aplicar estos datos, isothermas teóricas tienen que ser obtenidas y contrastadas con los datos experimentales para obtener la distribución de tamaño de poros.

Actualmente es habitual caracterizar estos materiales usando bancos de isothermas monoporos de adsorción (Estos bancos son la clave para una correcta y completa caracterización) simuladas ya sea por Monte Carlo u obtenidas por teoría del funcional de la densidad (NLDFT, QSDFT, etc.) utilizando potenciales simplificados que pueden llevar a interpretaciones incorrectas.

De lo mencionado anteriormente surge la necesidad de desarrollar nuevas técnicas que permitan obtener las PSD de una forma alternativa a la simulación o aproximaciones teóricas. Recientemente se han aplicado técnicas de procesamiento de imágenes para caracterizar superficies de grafeno para obtener características texturales de estos.

Por los motivos anteriormente expuestos se desarrolló un método que permite, a partir de una dada imagen TEM, obtener la distribución de tamaño de poros y así lograr una mejor caracterización del material bajo estudio. Para el análisis de la imagen se utilizó el software acceso libre Imagej, con este se realiza una estadística del diámetro de los mesoporos de un material cmk-3 y así se obtiene la PSD del mismo.

Jueves 28 de septiembre

10:00 am

Centro Cultural Pasaje Dardo Rocha

Auditorio

14:00 - Nuevos materiales compuestos híbridos para electrolitos sólidos con conductividad iónica notable

Cardillo E^{1 2}, Terny S^{1 3}, Hernandez L^{1 3}, Frechero M^{1 3}

¹ Instituto de Química del Sur, Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, 8000, Argentina

² Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires

³ CONICET

Los vidrios y las vitrocerámicas de óxidos, que contienen Litio en su composición, han sido extensamente estudiados en las últimas 3 décadas debido a su estabilidad térmica y alta conductividad iónica dada por el ion Litio. Sin embargo, para su aplicación en baterías de litio de estado sólido los valores de conductividad de estos materiales a temperatura ambiente requieren ser mejorados.

Los líquidos iónicos (LI) tienen propiedades interesantes: alta estabilidad térmica, buenas propiedades mecánicas y extremadamente baja presión de vapor a temperaturas moderadas. Se ha demostrado experimentalmente que la adición de LI a vidrios conductores iónicos aumenta notablemente su conductividad. No obstante, el mecanismo

que genera tal aumento de conductividad no está completamente explicado aunque su uso se considere promisorio en este campo.

En este trabajo reportamos la síntesis y caracterización de materiales híbridos compuestos por: electrolitos vítreos con matrices de composición basada en $[\text{MgO}/\text{P}_2\text{O}_5/\text{Bi}_2\text{O}_3]$ modificados con óxido de litio y Li de la familia de los imidazolios como el $[\text{BMIM}][\text{PF}_6]$.

Fundamentalmente, buscamos desarrollar conductores sólidos cuyos valores de conductividad superen a los actualmente alcanzados, del orden de $[10^{-4} - 10^{-3}] \text{ S.cm}^{-1}$ a temperatura ambiente.

Para alcanzar estos objetivos empleamos diferentes técnicas experimentales tales como: Difracción de Rayos X, Calorimetría Diferencial de Barrido, Análisis Térmico Diferencial, Densidad por el método del desplazamiento, Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier, Espectroscopia de UV-vis y Espectroscopia de Impedancia. Fourier, Espectroscopia de UV-vis y Espectroscopia de Impedancia.

14:20 - Excitón de coraza Li $1s$ resuelto en simetría en LiH

Paredes Mellone O A¹, Ceppi S¹, Arneodo Larochette P², Keith G³, Huotari S⁴, Stutz G¹

¹ Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, Instituto de Física Enrique Gaviola CONICET-UNC

² Centro Atómico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica

³ European Synchrotron Radiation Facility

⁴ University of Helsinki

La estructura electrónica del LiH es relativamente simple, lo cual hace a este compuesto iónico particularmente atractivo para utilizarlo como referencia en diferentes métodos computacionales de cálculos *ab initio*. La primera observación del borde K del Li fue realizada por Miki *et.al* [1] en monocristales del LiH. Basados en similitudes con resultados previos en espectros de absorción de LiF y los resultados teóricos disponibles en el momento [2,3] ellos asociaron el primer pico observado a 57.8 eV a un estado excitónico de coraza $1s$ del Li con la banda de conducción p . Ichikawa *et.al* [4] realizaron experimentos de espectroscopía de fotoelectrones en LiH clivado al vacío. Ellos asignaron la estructura prominente observada a 58.4 eV a un excitón de coraza Li $1s$.

Cálculos teóricos posteriores dieron sustento a estas afirmaciones [5]. Shirley [6] realizó cálculos de espectros de absorción basados en primeros principios en varios haluros de litio, observando que el pronunciado pico excitónico en LiH parecía estar fusionado con la porción continua del espectro. La inclusión de los efectos del hueco de coraza en las simulaciones probó ser determinante para la reproducción y predicción de la estructura fina de los espectros.

En este trabajo presentamos espectros de dispersión Raman de rayos X (XRS) del

borde K del Li en una muestra policristalina de LiH para diferentes valores de momento transferido. Las mediciones fueron realizadas en la línea XDS del Laboratorio Nacional de Luz de Sincrotrón (LNLS, Campinas, Brasil). La estructura fina cercana al borde es analizada en detalle por medio de cálculos basados en primeros principios. Dos métodos computacionales con diferentes grados de aproximación, tanto en la determinación de la estructura electrónica como en el tratamiento del hueco de coraza, fueron empleados. Haciendo uso de la potencialidad de esta técnica espectroscópica de poder variar el momento transferido en los experimentos XRS junto con los cálculos *ab initio*, se pudo determinar de manera inequívoca la simetría asociada al excitón de coraza Li 1s.

- [1]. Miki, T., Ikeya, M., Kondo, Y. and Kanzaki, H. Reflectance spectrum of lithium hydride at the Li K-absorption edge. *Solid State Communications*, 5, **39**, 647–649 (1981)
- [2]. Ewing, D. H. and Seitz, F. On the Electronic Constitution of Crystals; LiF and LiH. *Phys. Rev.*, 8, **50**, 760–777 (1936)
- [3]. Kunz, A. Barry and Mickish, D. J. Electronic structure of LiH and NaH. *Phys. Rev. B*, 4, **11**, 1700–1704 (1975)
- [4]. Ichikawa, K., Suzuki, N. and Tsutsumi, K. Photoelectron Spectroscopic Study of LiH. *Journal of the Physical Society of Japan*, 11, **50**, 3650–3654 (1981)
- [5]. Baroni, S., Pastori Parravicini, G. and Pezzica, G. Quasiparticle band structure of lithium hydride. *Physical Review B*, 6, **32**, 4077–4087 (1985)
- [6]. Shirley, E.L. Li 1s near-edge spectra in six lithium halides. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **137–140**, 579–584 (2004)

14:40 - Cubrimiento y estabilidad de perovskitas híbridas para aplicaciones fotovoltaicas

Caram J¹, Budini N², Arce R²

¹ Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET)

² Facultad de Ingeniería Química - Universidad Nacional del Litoral

En muy poco tiempo las celdas solares de perovskitas organo-metálicas superaron año a año sus propios records en eficiencia de conversión de energía (ECE), partiendo de un 3.8% [1] en el año 2009, hasta un 22.1% [2] en el presente. Dichas perovskitas híbridas, compuestas por metilaminas de haluros (Cl, Br, I) de plomo (por ej., MAPbI₃), mostraron ser muy promisorias para mejorar la ECE debido básicamente a su gran capacidad para absorber la radiación solar y a su alta eficiencia en el transporte de cargas. El panorama se vuelve aún más atractivo, dado que los métodos de síntesis por vías húmedas de las perovskitas son relativamente sencillos, escalables, y de bajas temperaturas, lo que conduce a menores costos que las celdas solares convencionales de silicio. No obstante, debido a la rapidez con la que sucede el proceso de cristalización con estos métodos, no es fácil conseguir películas delgadas homogéneas y

contínuas con tamaños de granos lo suficientemente grandes como para no introducir estados locales interfaciales que perjudiquen el transporte de carga. Estos inconvenientes afectan significativamente la ECE resultante en celdas solares, pero también son un obstáculo para depositar las perovskitas en sustrato aislantes para hacer medidas eléctricas. Es por eso que en este trabajo se presenta un estudio sistemático del cubrimiento sobre sustratos de vidrio, óxidos transparentes conductores y otros sustratos, en función de los parámetros de crecimiento. Se presenta también un resumido reporte del fenómeno de degradación más común de estas perovskitas: la hidratación debido a la humedad ambiente. Se discuten mecanismos y métodos para superar los obstáculos a la luz de los resultados.

[1]. Kojima et al, J. Am. Chem. Soc., 131, 6050-6051, 2009

[2]. De Angelis et al, ACS Energy Lett., pp. 857-861, 2017

15:00 - Estudio de las pérdidas por recombinación en la capa intrínseca de celdas solares de a-Si:H por métodos numéricos

Ramírez Jiménez H¹, Ruiz Tobón C M², Schmidt J A¹, Rubinelli F A²

¹ Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET)

² Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, (UNL-CONICET)

La simulación del comportamiento eléctrico y óptico de dispositivos semiconductores por métodos numéricos se ha convertido en una herramienta esencial para el análisis detallado y la posible mejora de sus rendimientos. Utilizando el código D-AMPS (*Analysis of Microelectronic and Photonic Structures + new Developments*) se estudian estructuras p-i-n de a-Si:H en el estado inicial con diferentes espesores de capa intrínseca. Los parámetros son obtenidos de los ajustes de las curvas características J-V a oscuras y bajo iluminación AM1.5. Nuestras simulaciones indican que en celdas de a-Si:H en el estado inicial, crecidas con o sin dilución de hidrógeno, los valores de V_{OC} y FF están limitados por pérdidas por recombinación a través de los estados de las colas y de los defectos en diferentes proporciones. Se analiza la influencia de la concentración de los defectos en los parámetros característicos de la celda solar. Se explora el impacto en la curva J-V bajo iluminación roja y AM1.5 al adoptar bajas movilidades de los portadores libres y una alta densidad de estados en el borde de la banda. Se examina la distribución de la carga atrapada, el campo eléctrico y las pérdidas por recombinación dentro de la capa intrínseca, y su influencia en el rendimiento de la celda solar. Se enfatiza la importancia de utilizar parámetros eléctricos realistas en el modelado y simulación de las celdas solares.

15:20 - Efecto de los halógenos como dopantes en las propiedades de Li_2O_2 : ¿Por qué el Cloruro sería especial?

Cortes H A^{1 2}, Barral M A^{1 2}, Vildosola V^{1 2}, Corti H^{1 2 3}

¹ Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET

² Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)

³ Inst. de Química Física de los Materiales Medio Ambiente y Energía, CONICET-UBA

Las baterías de Li-Aire (LABs) son un dispositivo prometedor para el almacenamiento de energía, con una densidad de energía específica aproximadamente un orden de magnitud mayor que el de las baterías de Li-ion actuales [1]. Sin embargo, su desarrollo práctico ha sido obstaculizado por diferentes limitaciones como: los altos sobre-potenciales de recarga, la baja capacidad de descarga y la baja ciclabilidad. Una de las mayores limitaciones es la naturaleza aislante del peróxido de litio, Li_2O_2 , principal producto de descarga de las LABs. Experimentos recientes indican que el dopaje con Cl aumenta la conductividad iónica del Li_2O_2 [2]. Posteriormente, se mostró que la adición de cloruro de litio, LiCl, al electrolito de la batería aumenta su capacidad de descarga, mientras que no se observa dicho aumento con otros halógenos. Este hecho fue atribuido a un incremento en la conductividad del Li_2O_2 al ser dopado con Cl, pero aún el mecanismo responsable de este efecto no es claro [3]. En este trabajo realizamos cálculos de primeros principios para estudiar los defectos intrínsecos (vacancias de Li^+ y polarones de hueco) y el efecto de los diferentes halógenos (F, Cl, Br, I) como defectos sustitucionales en el Li_2O_2 . Calculamos las energías de formación de los distintos defectos e impurezas, las barreras de activación y su coeficiente de difusión para poder explicar el transporte de carga observado en los experimentos. Nuestros resultados indican que los halógenos sustituyen un dímero de oxígeno y que la configuración más estable no da lugar a estados metálicos ni polarones que aumenten la conductividad electrónica. Por otro lado, observamos que si bien la energía de formación del F es levemente menor a la del Cl, este último promueve la formación de vacancias de Li en mayor medida que el resto de los halógenos, sugiriendo que el incremento en la capacidad de descarga observado para el sistema con Cl sería a causa de un aumento en la conductividad iónica, dado por la difusión de la vacancias de Li generadas por la presencia de ese dopante.

[1]. C. Luntz, B. D. McCloskey, Chem. Rev., 114, 11721(2014)

[2]. O. Gerbig , R. Merkle , J. Maier , Adv. Mater., 25 ,3129 (2013)

[3]. S. Matsuda, Y. Kubo, K. Uosaki, K. Hashimoto and S. Nakanishi, Phys. Chem. C 120, 13360 (2016).

15:40 - Asamblea