

# LIBRO DE RESÚMENES



## II Encuentro de Investigadores en Ciencia de Materiales



20 Y 21 DE ABRIL - 2023  
MONTEVIDEO - URUGUAY

**ISBN XXXXXXXXXXXX**

**II Encuentro de Investigadores en Ciencia de Materiales**  
**Hotel Dazzler - Montevideo – Uruguay**  
**20 y 21 de abril – 2023**  
**[www.ecm.cure.edu.uy](http://www.ecm.cure.edu.uy)**  
**eicienmat@gmail.com**

## ÍNDICE

---

Comité Organizador	.....	pág. 4
Auspicios y Apoyos	.....	pág. 5
Información Útil	.....	pág. 6
Programa	.....	pág. 9
Conferencias Plenarias	.....	pág. 10
Conferencias Invitados	.....	pág. 13
Conferencias	.....	pág. 24
Sesión Póster	.....	pág. 38
Sección A01	.....	pág. 39
Sección A02	.....	pág. 58
Sección A03	.....	pág. 67
Sección A04	.....	pág. 80
Sección A05	.....	pág. 84
Sección A06	.....	pág. 99
Sección A07	.....	pág. 126
Sección A08	.....	pág. 135
Lista de Participantes	.....	pág.171

## COMITÉ ORGANIZADOR

---

Dr. Mauricio Rodríguez	CURE
Dra. María Eugenia Pérez	CURE
Dra. Sofia Favre	Fac. Ingeniería
Dr. Javier Pereyra	Fac. Ingeniería
MSc. Mariana Silva	Fac. Ingeniería
Dra. Ivana Aguiar	Fac. Química
Dra. Livia Arizaga	Fac. Química
Dra. Andrea De León	Fac. Química
Dr. Mariano Romero	Fac. Química
Dra. Marcela Ibañez	CUT
Arq. Alma Varela	FADU
Arq. Santiago Pons	FADU

## EL ENCUENTRO

---

Este encuentro es una iniciativa de un conjunto interdisciplinario de jóvenes investigadores uruguayos (de los siguientes centros: Facultad de Química, Facultad de Ciencias, Facultad de Ingeniería, Centro Universitario Regional del Este, Centro Universitario Regional Noreste, Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo), que ven la necesidad de generar este tipo de instancias para promover el intercambio de conocimientos, experiencias, técnicas y fomentar la participación de jóvenes en el área de materiales tanto dentro de Uruguay como con la región.

El primer encuentro, realizado en abril del 2018, tuvo la participación de 130 estudiantes, investigadores y profesionales del área. Esperamos que este segundo encuentro permita ampliar la difusión del área en el medio académico, estableciendo así las bases para la continuidad de estos encuentros y la participación del sector industrial en ellos. El congreso abarca una gran variedad de temáticas dentro de las cuales se destacan: Energía y Sostenibilidad, Salud (incluyendo biomateriales), Electrónica, Catálisis, Agroforestal, Materiales para la construcción, Metalúrgica y comportamiento mecánico, y Otros materiales de interés tecnológico.

Se cuenta con un total de 180 trabajos presentados, divididos en 150 posters y 13 charlas de estudiantes e investigadores, 9 charlas invitadas locales e internacionales. Dentro de los expositores tenemos brasileros, argentinos, chilenos, españoles y uruguayos. El evento contará con más de 160 participantes (84 mujeres).

**Comité Organizador del EICM**

## AUSPICIAN



Facultad de Arquitectura,  
Diseño y Urbanismo  
UDELAR



CENUR  
NORESTE



FACULTAD DE  
INGENIERÍA  
UDELAR



FACULTAD DE  
CIENCIAS  
UDELAR | [fciem.edu.uy](http://fciem.edu.uy)



FACULTAD DE  
QUÍMICA  
UDELAR



CURE  
Centro Universitario  
Regional del Este



UNIVERSIDAD  
DE LA REPÚBLICA  
URUGUAY



Ministerio  
de Educación  
y Cultura

Declarado  
de Interés  
Ministerial



Ministerio  
de Industria,  
Energía y Minería



UruguayNatural  
Ministerio de Turismo



ENDORSED  
MEETING



Sociedad  
Uruguaya de  
Física

## APOYAN



PEDECIBA



Espacio Interdisciplinario  
Universidad de la República  
Uruguay



fundaQuim  
Fundación para el progreso de la Química

SPONSOR Oro



SPONSOR Plata



MERCK

SPONSOR

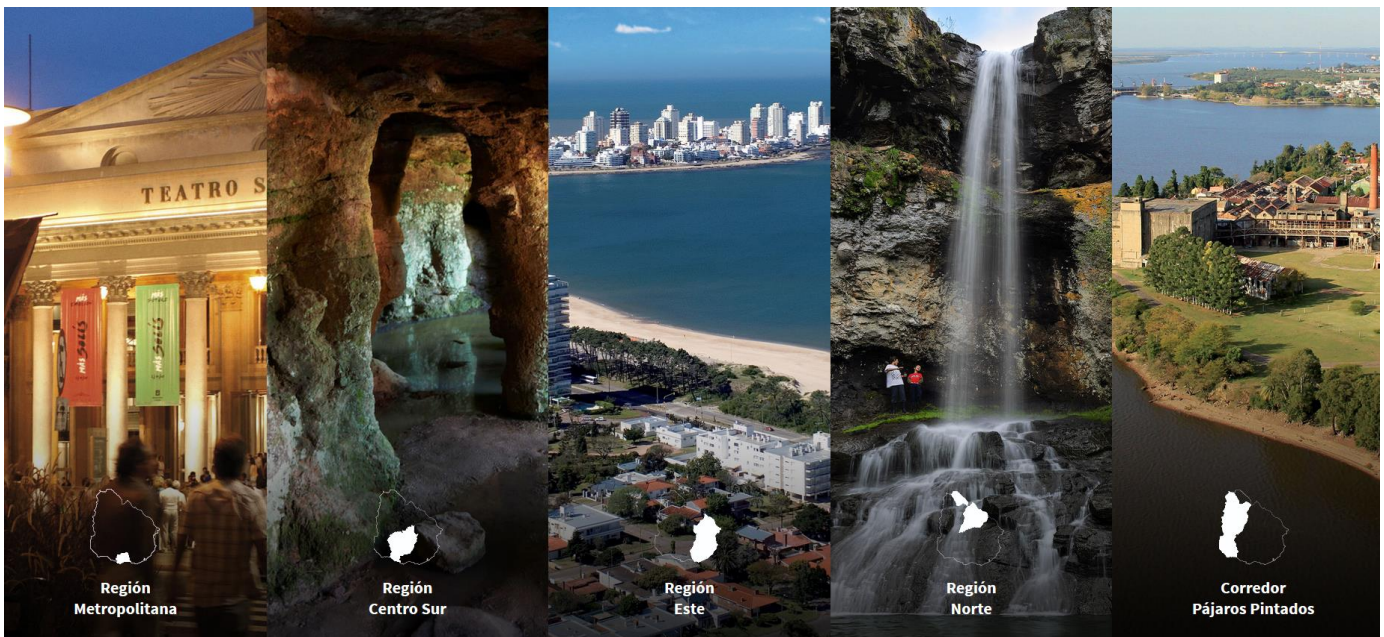


## SOBRE MONTEVIDEO – URUGUAY

Capital nacional del Uruguay, se ubica en la costa sur del país sobre el Río de la Plata. Es una ciudad descrita como un lugar vibrante y ecléctico con una vida cultural muy rica. En su extensión de 20 Km, la ciudad se viste con variadas caras, desde su puerto industrial hasta sus playas exclusivas en Carrasco, a través de su bella rambla costera. Montevideo se caracteriza por tener una variada oferta cultural, entre las que se destaca su música, sus teatros antiguos y sus espacios culturales. Además, posee una variada oferta culinaria que va desde pequeños bares de tango hasta restaurantes de lujo. La noche tiene su propia movida, ofreciendo al visitante la posibilidad de encontrar varias opciones dentro de las que se destacan discotecas, conciertos al aire libre, entre otras.

<https://turismo.gub.uy/>

**Top things to do** - <https://uruguaynatural.com/index.php/que-hacer>



Imágen – Ministerio de Turismo

# HOTEL DAZZLER – CENTRO DE CONFERENCIAS

by Wyndham Montevideo

21 de Setiembre 2752 (11300), Montevideo, Uruguay

Reservas: (+59 8) 2716 0000

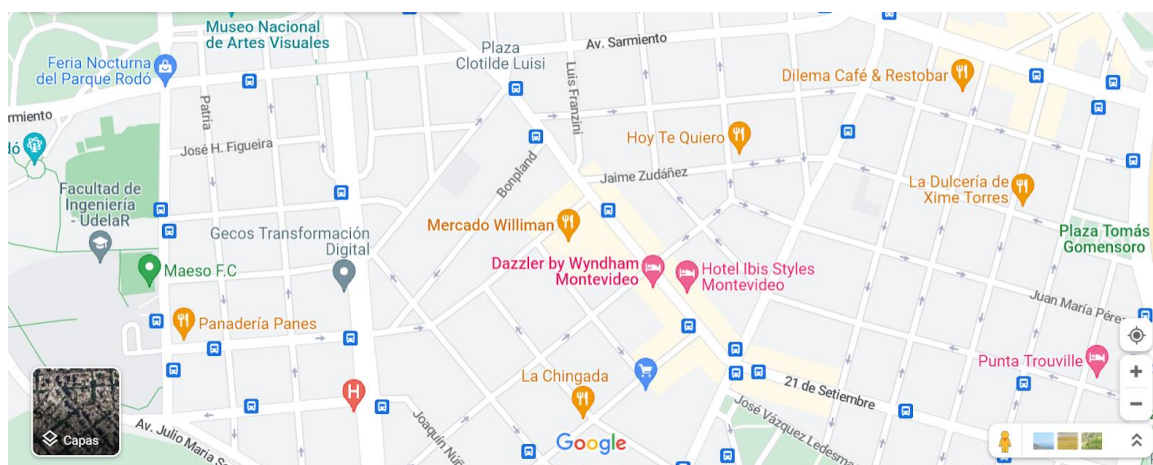
Recepción: (+59 8) 2716 0000

WhatsApp: (+598)094870193

[reservas@dazzlermontevideo.com](mailto:reservas@dazzlermontevideo.com)

<https://dazzlermontevideo.com/>

Es una propuesta moderna en el corazón de Pocitos, barrio de moda de la ciudad. Dazzler Montevideo se encuentra rodeado de atractivos gastronómicos, culturales y comerciales. El hotel cuenta con fácil acceso a las atracciones de la ciudad, al Puerto de Montevideo, al Aeropuerto y al World Trade Center, punto corporativo de la ciudad.



# MERCADO WILLIMAN

Claudio Williman 626,  
Esq. 21 de Setiembre y Francisco Ros, Montevideo, Uruguay.

<http://www.mercadowilliman.com.uy/>

Centro gastronómico y cultural de Montevideo, donde vivir la experiencia de saborear las mejores propuestas gastronómicas se fusiona con un entorno de música, entretenimiento, arte y espectáculos. Una oportunidad única de desarrollar y compartir tu corazón culinario. Disfrutá de un mercado vivo, con novedades constantes que hacen de cada visita una experiencia diferente.





<b>EL ENCUENTRO</b>			
<b>hora</b>	<b>20-Abr</b>	<b>hora</b>	<b>21-Abr</b>
8:30 - 9:30	Registro y recepción		
9:30 - 10:00	<b>Apertura</b>	9:00 - 10:00	<b>Dr. Caue Ribeiro (EMBRAPA)</b> <b>Charla Plenaria</b>
10:00 - 11:00	<b>Dra. Liliana Mogni (CONICET - CNEA)</b> <b>Charla Plenaria</b>	10:00 - 10:30	<b>Dra. Marcela Ibañez (CUT)</b> <b>Charla Invitada</b>
11:00 - 11:30	<b>Dr. Andrés Pérez (CURE)</b> <b>Charla Invitada</b>	10:30 - 11:00	Coffee break
11:30 - 11:50	Lucía Amy	11:00 - 11:20	Daiane Fernandes
11:50 - 12:10	Aníbal Carmona	11:20 - 11:40	Nicole Lecot
12:10 - 14:00	Almuerzo	11:40 - 12:00	Nora Susana Pellegrini
14:00 - 14:30	<b>Dr. Ricardo Faccio (FQ)</b> <b>Charla Invitada</b>	12:00 - 14:00	Almuerzo
14:30 - 14:50	Fernando Lanzini	14:00 - 14:30	<b>Dr. Ricardo Marotti (FING)</b> <b>Charla Invitada</b>
14:50 - 15:10	Santiago Seiler	14:30 - 14:50	Edgardo Benavidez
15:10 - 15:30	Caroline Schmechel	14:50 - 15:10	Enzo Spera
15:30 - 16:00	Coffee break	15:10 - 15:40	Coffee break
16:00 - 16:20	Matheus Hipólito Lemos De Lima	15:40 - 16:10	<b>Dra. Alicia Durán (CSIC)</b> <b>Charla Invitada</b>
16:20 - 16:40	Mayra Doldán	16:10 - 16:30	Romina Acevedo
16:40 - 17:10	<b>Dra. Silvana Alborés (FQ)</b> <b>Charla Invitada</b>	16:30 - 17:00	<b>Arq. Roberto Santomauro (Sobresaliente-Bauhaus)</b> <b>Charla Invitada</b>
17:10 - 19:00	Sesión de posters	17:00 - 19:00	Sesión de posters
19:00 - 22:00	Brindis - Mercado Williman	19:00 - 19:30	<b>Cierre</b>

## RESÚMENES – Conferencias Plenarias (50 + 10 minutos)

---

**Prof. Dra. Liliana Mogni**

**Un recorrido desde el laboratorio de materiales hacia la utilización de pilas de combustibles y electrolizadores de alta temperatura como una herramienta para la transición energética.**



Investigadora Principal del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y de la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Centro Atómico Bariloche, Argentina. Profesora del Instituto Balseiro (Universidad Nacional de Cuyo, Argentina) Doctora en Ciencias de la Ingeniería – Instituto Balseiro (2007), Licenciada en Química – Universidad Nacional de La Plata (2001).

**Prof. Dr. Caue Riveriro**

**Los nuevos materiales y la nanotecnología: aliados para el desarrollo sostenible en la agricultura**



Investigador de la Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (Embrapa), Sao Carlos, SP, Brasil. Es Ingeniero de Materiales (con énfasis de Materiales Cerámicos) por la Universidad Federal de San Carlos (1999), Maestría en Ciencias y Ingeniería de los Materiales por la Universidad Federal de San Carlos (2002) y Doctor en Química por la Universidade Federal de São Carlos (2005). Es coordinador de la Red de Nanotecnología para la Agricultura (<https://www.embrapa.br/nano>) y del Laboratorio Nacional de Nanotecnología para la Agricultura (<https://www.embrapa.br/pt/laboratorio-nacional-de-nanotecnologia-para-o-agronegocio-lnna>).

## **Un recorrido desde el laboratorio de materiales hacia la utilización de pilas de combustibles y electrolizadores de alta temperatura como una herramienta para la transición energética.**

Liliana Mogni

*Instituto de Nanociencia y Nanotecnología. CNEA-CONICET. Centro Atómico Bariloche. Instituto Balseiro, Argentina.*

Las pilas de combustible y electrolizadores de alta temperatura son dispositivos reversibles basados en óxidos cerámicos que convierten energía química de un combustible liviano en electricidad y calor con alta eficiencia y baja emisión de CO<sub>2</sub>, o producen combustibles (H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>) por electrólisis de H<sub>2</sub>O o CO<sub>2</sub> con altos rendimientos. La adopción masiva de esta tecnología requiere reducir costos de fabricación, mantenimiento y operación para lograr dispositivos más accesibles. Estos dispositivos están basados en apilamientos (stacks) de ensambles de ánodos/electrolito/cátodos separados por interconectores compuestos por materiales cerámicos que requieren elevadas temperaturas de procesamiento (> 1300 C) y también operan a altas temperaturas (T>800 C). A mayor temperatura, mayor eficiencia y versatilidad para operar con diversos combustibles, pero también mayor degradación de los materiales. Desde la ciencia e ingeniería de materiales se busca identificar y estudiar nuevos materiales y aplicar conceptos de diseño con el objetivo de optimizar procesos de fabricación, mejorar rendimientos de operación para disminuir la temperatura de operación y extender la vida útil. En estos dispositivos, el transporte de carga (iónica y electrónica) y las reacciones del electrodo sólido-gas dependen de las estructuras atómicas y electrónicas del interior del electrodo/electrolito y de la superficie del electrodo, respectivamente. Por otra parte, estos dispositivos funcionan en condiciones no ambientales (alta temperatura, atmósfera reductora/oxidante, condiciones de polarización catódica/anódica, etc.), lo que podría inducir cambios en las estructuras de los materiales que afectan su desempeño. Nuestro grupo ha abordado diferentes estrategias para comprender los fenómenos en su conjunto, correlacionar las propiedades microestructurales con las propiedades de interés y retroalimentar con esta información diferentes estrategias de diseño de materiales. En esta presentación discutiremos algunos casos emblemáticos con el objetivo de desarrollar herramientas que permitan construir y operar dispositivos, demostrando esta tecnología en entornos reales.

## **Los nuevos materiales y la nanotecnología: aliados para el desarrollo sostenible en la agricultura**

Caue Ribeiro

Embrapa Instrumentacao / Brazilian Agricultural Research Corporation - Instrumentation

En esta charla, exploraremos cómo los materiales juegan un papel fundamental en la producción agrícola moderna, desde la construcción de maquinarias hasta la mejora de la calidad de los cultivos. A través de ejemplos concretos, veremos cómo la ciencia de materiales está detrás de innovaciones clave que han permitido a los agricultores aumentar la eficiencia y productividad de sus cultivos, mejorar la resistencia de las plantas a factores ambientales adversos y reducir el impacto ambiental de la agricultura. Además, discutiremos cómo la investigación en ciencia de materiales seguirá siendo crucial en el futuro para abordar los desafíos de la seguridad alimentaria y la sostenibilidad en el contexto de un clima cambiante.

## RESÚMENES – Conferencias Invitadas (25 + 5 minutos)

---

**Dr. Andrés Pérez**

**Aportes de la ciencia de materiales al estudio de micro y nanoplásticos.**



Es Doctor en Química, por la Facultad de Química, Universidad de la República (Udelar). Es investigador del Sistema Nacional de Investigadores y de PEDECIBA Química. Es Profesor Adjunto Departamento de Desarrollo Tecnológico, CURE, Rocha, UDELAR. Posee aproximadamente 40 artículos publicados en revistas arbitradas, 80 presentaciones en congresos nacionales e internacionales. Sus intereses son la química analítica ambiental de contaminantes orgánicos y partículas, la Espectrometría de masas, y el destino ambiental de contaminantes orgánicos – pesticidas, fármacos, polímeros. También investiga en tecnologías de depuración de aguas y potabilización.

**Dr. Ricardo Faccio**

**Mixed ionic-electronic transport in crystalline P3HT with explicit dopants and additives: ab-initio & machine learning force fields molecular dynamics.**



Es Doctor en Química por la Facultad de Química, Universidad de la República (Udelar). Investigador Nivel III del SNI-ANII. Investigador Grado 5 del PEDECIBA Química. Es Prof. Titular de Física de la Facultad de Química, Universidad de la República. La investigación se desarrolla en torno a la síntesis, caracterización, simulación y estudio de desempeño de nanomateriales con aplicaciones en energía. <http://cryssmat.fq.edu.uy/ricardo/ricardo.htm>

**Dra. Silvana Alborès**

**Nanotecnología microbiana: aportes en nuevos materiales antimicrobianos**



Es Doctora en Química – Magister en Biotecnología, por la Facultad de Química, Universidad de la República (Udelar). Es Investigadora de PEDECIBA Química y del Sistema Nacional de Investigadores. Profesora Adjunta de Microbiología, Dedicación Total, Facultad de Química, UDELAR. Responsable de líneas de investigación, cursos de Posgrado, proyectos con colaboración nacional e internacional en el área de Nanobiotecnología, en particular en la síntesis de nanopartículas biogénicas y el desarrollo de materiales antimicrobianos.

**Dra. Marcela Ibañez**

**Versatilidad de los materiales basados en madera**



Es Ingeniera Química y Doctora en Química por la Facultad de Química, Universidad de la República de Uruguay. Pertenece al SNI y PEDECIBA. Es docente e investigadora, pertenece al Instituto Superior de Estudios Forestales, de la Sede Tacuarembó, del Cenur Noreste de Universidad de la República. Sus principales temas de investigación son el desarrollo de productos protectores para madera, de aplicación superficial y en profundidad, de baja toxicidad tanto orgánicos como inorgánicos, con propiedades funguicidas, insecticidas e ignífugas; los procesos de deterioro de madera por hongos de pudrición y su bioquímica; y el desarrollo de biomateriales con hongos, entre otros. Ha dirigido varias tesis de grado y posgrado de la Universidad.

**Dr. Ricardo Marotti**

### **Propiedades Ópticas de Perovskitas de Halogenuros Metálicos a Bajas Temperaturas**



Es Ingeniero Electricista, por la Facultad de Ingeniería (Fing) de la Universidad de la República (Udelar), Montevideo, Uruguay. Doctor en Física por la Universidad Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas, Sao Paulo, Brasil. Investigador del Sistema Nacional de Investigación y de PEDECIBA Física. Es docente con Dedicación Total, del Instituto de Física de Fing e integrante del Grupo de Física de Estado Sólido desde su fundación en 1998. Allí es responsable del Laboratorio de Caracterización Óptica. Su interés son las Propiedades Ópticas de Materiales, donde estudia materiales semiconductores y materiales nanoestructurados principalmente para aplicaciones fotovoltaicas.

**Dra. Alica Durán**

### **Bienvenidos a la edad del vidrio**



Líder del grupo de investigación GlaSS del Instituto de Cerámica y Vidrio (CSIC), España, es Profesora de Investigación del CSIC, el mayor organismo de investigación del país. Es Licenciada en Física por la Universidad Nacional de Córdoba (Argentina) y PhD por la Universidad Autónoma de Madrid. El grupo Glass es la referencia en España sobre I+D en vidrios y vitrocerámicos, y su objetivo general es el diseño, procesado y caracterización de vidrios, vitrocerámicos y materiales sol-gel, desde las características estructurales

hasta las propiedades (ópticas, mecánicas, químicas, térmicas, eléctricas, etc.) y aplicaciones.

En 2021, la Asamblea General de las Naciones Unidas aprobó el Año Internacional del Vidrio 2022 (IYOG2022). Un proyecto apoyado por más de 2500 instituciones de 96 países, liderado por la Misión Española en UN-NY y coordinado por la investigadora. Con más de 270 publicaciones en WOK, fue Presidenta de la Comisión Internacional del Vidrio (ICG) en el período 2018-2021. Recibió el Premio Phoenix de la industria internacional del vidrio, siendo nombrada Persona del Vidrio del Año 2019 y el Premio Otto-Schott en 2022.

**Arq. Roberto Santomauro**

**ARQUITECTURA TEXTIL el uso del plástico en las membranas de uso arquitectónico.**



Es arquitecto, por la Facultad de Arquitectura de la Universidad de la República (Udelar). Es presidente del área de arquitectura textil para América Latina del IMS Bauhaus® – [www.ims-institute.org](http://www.ims-institute.org). Integrante del comité directivo de la red latinoamericana de tensoestructuras [www.latensored.org](http://www.latensored.org). Presidente del IV simposio de tensoestructuras de la tensoed (Montevideo 2011). Labor docente en: Uruguay, Argentina, Paraguay, Perú, USA, Alemania. Socio en [www.ixray-ltd.com](http://www.ixray-ltd.com) software de análisis membranar italiano. Autor del libro “Tensoestructuras desde Uruguay”



## **Aportes de la ciencia de materiales al estudio de micro y nanoplásticos**

Andrés Pérez Parada <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Desarrollo Tecnológico, Centro Universitario Regional del Este, Universidad de la República, Ruta 9 esquina Ruta 15, Rocha, Uruguay*

\* [aperez@cure.edu.uy](mailto:aperez@cure.edu.uy)

Los micro y nanoplásticos (MNP) son partículas de polímeros sintéticos considerados contaminantes emergentes de preocupación para la salud humana, animal y vegetal. Su presencia en sistemas naturales acuáticos y terrestres ha sido demostrada y se está incrementando el reporte de las mismas en ejemplos diversos así como las preocupaciones sobre sus efectos en los organismos vivos ha despertado un gran interés académico.

En esta presentación, se introducirá a la temática desde una perspectiva ambiental mostrando las externalidades de los polímeros sintéticos y los desafíos de sostenibilidad. Se mostrarán los aportes de la ciencia de materiales en el estudio y comprensión de la formación, caracterización, destino ambiental y efectos de los MNP en organismos vivos.

Diversas técnicas instrumentales de caracterización de materiales han sido empleadas en el estudio de MNP. Se presentarán las aproximaciones más utilizadas en la literatura para identificación de materiales, cuantificación, estudio de fenómenos superficiales, aislamiento de partículas, estudios de remoción, entre otros.

Serán presentados algunos antecedentes en nuestro grupo [1] y trabajos que están siendo desarrollados actualmente en el uso de técnicas termoanalíticas acopladas a espectrometría de masas así como síntesis de materiales de referencia de MNP.

[1] I. Sierra, M. Rodríguez Chialanza, R. Faccio, D. Carrizo, L. Fornaro, A. Pérez-Parada. *Environmental Science and Pollution Research* (2020) 27:7409–7419

## Mixed ionic-electronic transport in crystalline P3HT with explicit dopants and additives: *ab-initio* & machine learning force fields molecular dynamics

Ricardo Faccio, Dominique Mombrú, Mariano Romero & Álvaro W. Mombrú.

Área Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

rfaccio@fq.edu.uy

Here, we present *ab-initio* molecular dynamics (AIMD) and Machine Learning Force Fields molecular dynamics (MLFFMD) calculations on the mixed ionic-electronic transport for crystalline poly(3-hexylthiophene) (P3HT) using explicit lithium bis(trifluoromethanesulfonyl) imide (LiTFSI) dopant and dimethoxyethane (DME) additive. Up to now, very few works have been reported using AIMD calculations dealing with mixed ionic-electronic transport in crystalline P3HT, including explicit dopants and additives [1, 2]. Our ionic and electronic conductivities estimations show good correlation with experimental reports of similar mixed ionic-electronic conductors. The explicit atomistic treatment of all components in the calculations allowed us to reveal some interesting behavior due to the presence of dopants on the most relevant parameters associated to mixed ionic-electronic transport in a wide temperature range. For the electronic transport, our transfer integral ( $J$ ) and reorientation energies ( $\lambda$ ) values showed an increment respect to typical unexplicit-doped calculations. Furthermore, we also introduce the role of the explicit dopant on the inter-chain, intra-chain, “effective” doping and charge-transfer complex bonding distances and their associated static and dynamic disorder effects on the electronic transport. All these properties have been properly recovered with the use of the state-of-the-art tools, such as MLFFMD as implemented in VASP 6.3[3-6], in order to increase the number of explicit atoms, thus reducing the memory requirements and speeding up the molecular dynamics simulations.

### References

- [1] D. Mombrú, M. Romero, R. Faccio, Á.W. Mombrú, *Polym. J.*, 54 (2022) 1465-1476.
- [2] D. Mombrú, M. Romero, R. Faccio, Á.W. Mombrú, *The Journal of Physical Chemistry C*, 124 (2020) 7061-7070.
- [3] G. Kresse, J. Furthmüller, *Physical Review B*, 54 (1996) 11169-11186.
- [4] G. Kresse, J. Furthmüller, *Computational Materials Science*, 6 (1996) 15-50.
- [5] G. Kresse, J. Hafner, *Physical Review B*, 47 (1993) 558-561.
- [6] G. Kresse, J. Hafner, *Physical Review B*, 49 (1994) 14251-14269.

## Nanotecnología microbiana: aportes en nuevos materiales antimicrobianos

Paula Sanguiniedo<sup>a</sup>, María Belén Estevez<sup>a</sup>, Noheilly Vasquez<sup>a</sup>, Valeria Elizalde<sup>a</sup>, Valeria Grazu<sup>b</sup>,  
Scott Mitchell<sup>b</sup>, Helena Pardo<sup>c</sup>, Ricardo Faccio<sup>c</sup>, Silvana Alborés<sup>\* a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República. Gral. Flores 2124, Montevideo, Uruguay*

<sup>b</sup> *Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón. CSIC-Universidad de Zaragoza. Pedro Cerbuna, 12, Zaragoza, España.*

<sup>c</sup> *Centro NanoMat & Grupo Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones, Facultad de Química, Universidad de la República. Isidoro de María 1614, Montevideo, Uruguay*

\* E-mail: salbores@fq.edu.uy

La utilización de nanopartículas para el control de microorganismos se ha expandido considerablemente en los últimos años en las áreas de salud humana y animal, agrícola y de materiales. La baja dimensionalidad de las nanopartículas incrementa el potencial de penetración, permitiendo su mejor utilización en la prevención de infecciones microbianas, en dispositivos médicos, en el tratamiento de enfermedades infecciosas, incluyendo frente a bacterias resistentes a antibióticos y a biofilms microbianos. El potencial antimicrobiano de las nanopartículas es también muy promisorio en el área agro-alimentaria con ejemplos de uso de las mismas en la conservación de alimentos, materiales de empaque o el control de fitopatógenos con alto impacto en la agricultura. Asimismo, se han hecho avances recientes en la síntesis biológica de nanopartículas para diferentes aplicaciones como agentes antimicrobianos activos en el desarrollo de nuevos materiales antimicrobianos. La síntesis biológica por microorganismos es una alternativa utilizada para la producción de nanopartículas metálicas a los métodos físicos y químicos convencionales que pueden utilizar reactivos tóxicos y/o costosos y condiciones de reacción adversas.

En este contexto, nuestro grupo interdisciplinar ha trabajado en la síntesis microbiana de nuevos nanomateriales con propiedades antimicrobianas, antibiofilm y de baja toxicidad. Hemos producido nanopartículas metálicas biogénicas utilizando extractos extracelulares de microorganismos [1]. Estas nanopartículas fueron caracterizadas y evaluadas frente a bacterias multiresistentes, fitopatógenos y biofilms microbianos. Además, hemos estudiado las interacciones entre dichas nanopartículas biogénicas y las células microbianas, utilizando técnicas de microscopía (TEM, SEM, AFM y CRM), para comprender los mecanismos antimicrobianos de estas nanopartículas [2, 3]. Estas nanopartículas también pudieron inhibir, interrumpir o erradicar los biofilms microbianos así como controlar fitopatógenos de interés agroalimentario [4,5].

Estas propiedades de las nanopartículas microbianas son de gran utilidad para el desarrollo de nanomateriales antimicrobianos de aplicación en diferentes áreas, como la salud, la agricultura, la alimentación y la industria.

[1] P. Sanguiniedo, R.M. Fratila, M.B Estevez, J.M. de la Fuente, V. Grazú, S. Alborés, Nano. Biomed. Eng., 10 (2018) 156-164.

[2] M.B. Estevez, S.G. Mitchell, R. Faccio, S. Alborés. Mater. Res. Express, 6 (2019).

[3] M.B. Estevez, M.L. Casaux, M. Fraga, R. Faccio, S. Alborés. Front. Bioeng. Biotechnol., 9 (2021)

[4] M.B. Estevez, S. Raffaelli, S.G. Mitchell, R. Faccio, S. Alborés. Molecules, 25 (2020).

[5] P. Zimet, R. Valadez, S. Raffaelli, M.B. Estevez, H. Pardo, S. Alborés. Chem. 3 (2021) 1271-1285.

## Versatilidad de los materiales basados en madera

Marcela Ibañez, Rafael Soares, Daniela Oreggioni

Instituto Superior de Estudios Forestales, Sede Tacuarembó, Cenur Noreste, Udelar

claudia.ibanez@pedeciba.edu.uy

Los materiales lignocelulósicos son considerados el futuro de los materiales sostenibles, por provenir de fuentes renovables, capaces de producir compuestos químicos que sirven de plataforma para diversos productos de uso humano. En particular, los productos basados en madera, material lignocelulósico con más de 390 millones de años de evolución, los encontramos orientados a aplicaciones de alto impacto que incluyen componentes de fuentes de energía sostenible, de electrónica, materiales de construcción energéticamente eficientes, entre otros. En este trabajo se presentan dos aplicaciones que estudia nuestro grupo de investigación, una orientada a la construcción, como es la obtención de madera transparente y otra basada en la biorrefinería, donde se obtiene taninos de especies madereras de madia a alta durabilidad natural y se emplean como conservadores para madera.

La madera trasparente se estudia como un material novedoso por su alta transmitancia, que proporciona un aislamiento térmico eficiente y excelentes propiedades mecánicas para aplicaciones potenciales en edificios inteligentes, y en óptica estructural [1,2]. A partir de maderas comerciales uruguayas de *Pinus taeda* y *Eucaliptus grandis*, se realizaron deslignificaciones parciales y total de la madera y un blanqueo previo a la infiltración de resina epoxi en el molde poroso. Se comparó el comportamiento de ambas especies, así como los espectros FTIR. Se analizaron los parámetros del proceso que pueden influir en un escalado del mismo.

*Gletsidia triacanthos* es una especie arbórea categorizada como invasora, que produce severo impacto ecológico debido a que desplaza especies nativas provocando cambios en la estructura de la comunidad. Por lo cual encontrar aplicaciones a su madera mitiga en parte su abundancia. Al duramen de esta especie se le extraen los taninos por maceración y Soxhlet, y se verifica la presencia de los polifenoles por análisis de los espectros FTIR. El extracto se prepara con ácido bórico y hexamina y se impregnan maderas nacionales con la mezcla. Los resultados muestran que la mezcla resiste a la lixiviación de la madera más que sus componentes separados y son excelentes protectores para madera [3].

[1] Li YY, Guo XL, He YM, Zheng RB Eur. J. Wood Wood Prod (2017)

[2] Wang LH, Liu YJ, Zhan XY, Luo D, Sun XW J. Mater.Chem (2019)

[3] Ibañez CM; Pintos X, Pereira E, Mantero C, Raimonda P Int. Resear Group Wood Prot. Proceeding (2019)

[4] Ibañez CM, Romero M, Camargo A Environ. Sci. Proc. (2022) 13, 9

## Propiedades Ópticas de Perovskitas de Halogenuros Metálicos a Bajas Temperaturas

Daniel L. Gau <sup>a</sup>, Daniel Ramírez <sup>b</sup>, Isabel Galain <sup>c</sup>, Fernando Iikawa <sup>d</sup>, Gonzalo Riveros <sup>b</sup>, Patricia Díaz <sup>b</sup>, Javier Verdugo <sup>b</sup>, Gerard Núñez <sup>b</sup>, Susy Lizama <sup>b</sup>, Pamela Lazo <sup>b</sup>, Enrique A. Dalchiele <sup>a</sup>, Ivana Aguiar <sup>c</sup>, Carina Cabrera <sup>a</sup>, Enzo L. Spera <sup>a</sup>, Nicolás Molina <sup>a</sup>, C. Javier Pereyra <sup>a</sup>, Mariana Berruet <sup>e</sup>, Juan A. Anta <sup>f</sup>, Lidia Contreras-Bernal <sup>f</sup>, Antonio Riquelme <sup>f</sup>, Jesús Idigoras <sup>f</sup>, Ricardo. E. Marotti <sup>\*a</sup>.

<sup>a</sup> Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, CC30, CP 11000, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> Instituto de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso, Avenida Gran Bretaña 1111, Playa Ancha, Valparaíso, Chile.

<sup>c</sup> Grupo de Desarrollo de Materiales y Estudios Ambientales, Área de Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, Av. General Flores 2124, Montevideo, Uruguay.

<sup>d</sup> Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidad de Campinas, 13083-859 Campinas, São Paulo, Brazil.

<sup>e</sup> División Electroquímica Aplicada, INTEMA, Facultad de Ingeniería,

CONICET-Universidad Nacional de Mar del Plata, Av. Colón 10850, B7606BWV, Mar del Plata, Argentina.

<sup>f</sup> Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide, E-41013, Sevilla, España

\* rmarotti@fing.edu.uy

Se estudian las propiedades ópticas a bajas temperaturas de las siguientes perovskitas inorgánicas de halogenuros metálicos: CsPbBr<sub>3</sub> y CsPbI<sub>3</sub>. En el caso de perovskitas híbridas se demostraron celdas solares fotovoltaicas con eficiencia de conversión de energía comparable a las de celdas comerciales de Si [1]. Sin embargo las perovskitas híbridas tienen problemas de estabilidad, que son menos importantes en las perovskitas inorgánicas. El CsPbBr<sub>3</sub> fue preparado en forma de películas delgadas por una vía de tres etapas de bajo costo, siendo la primera de ellas electroquímica [2], que reduce los desechos tóxicos. El CsPbI<sub>3</sub> fue preparado por el método de hot-injection [3] que da lugar a nanopartículas cúbicas de  $32 \pm 5$  nm de tamaño. Las propiedades ópticas fueron estudiadas en un crióstato entre 10 y 290 K. Para medir fotoluminiscencia se excitó con un LED que emite en torno a 365 nm.

Los espectros de absorción de las películas de CsPbBr<sub>3</sub> muestran un claro pico de absorción excitónico entre 2.3 y 2.4 eV, incluso a temperatura ambiente. Este pico se encuentra por debajo de la absorción entrebandas, incrementada por interacción coulombiana. En las nanopartículas de CsPbI<sub>3</sub> la aparición del pico de absorción excitónico se da claramente por debajo de los 220 K, y se encuentra entre 1.74 y 1.81 eV. Ajustes de la función de Elliott [4] permiten estudiar la dependencia con la temperatura de la energía del bandgap, la energía de ligación del excitón y el ancho del pico excitónico. La energía del bandgap aumenta con la temperatura de forma opuesta a lo que se observa en semiconductores tetragonales tradicionales. Se discuten posibles causas de esta discrepancia. Los espectros de fotoluminiscencia tienen un corrimiento Stokes de varias decenas de meV, que podrían indicar que su origen es en estados de defectos, pero el estudio del corrimiento Stokes, la intensidad de la fotoluminiscencia con la intensidad de iluminación y el ancho de los picos (dominado por interacción con fonones ópticos) con la temperatura, permite asegurar que también se debe a efectos excitónicos.

[1] M. A. Green, et al, Prog. Photovoltaic Res. Appl. 28 (2020) 629-638.

[2] D. Ramírez, et al, ChemElectroChem 7 (2020) 3961-3968.

[3] B. Tang, et al, Adv. Optical Mater. 2020 (2020) 2000498.

[4] R. J. Elliott, Physical Review 108, 6 (1957).

## **Bienvenidos a la edad del vidrio**

Alicia Durán

Instituto de Cerámica y Vidrio (CSIC)

Presidenta del Año Internacional del Vidrio de Naciones Unidas (IYOG2022)

\* E-mail: [aduran@icv.csic.es](mailto:aduran@icv.csic.es)

Durante los últimos 60 años la Asamblea General de la ONU ha reconocido contribuciones e iniciativas globales de gran importancia para la sociedad mediante la Declaración de Años Internacionales. En el siglo XXI, reconocieron el Año Internacional de la Astronomía (2009), el Año de la Química (2011), el Año de la Luz y las Tecnologías Basadas en la Luz (2015) y, en 2019, el Año de la Tabla Periódica y el Año Internacional de las Lenguas Indígenas. En este contexto, surgió la idea, con fuerte apoyo internacional, de proponer un Año Internacional del Vidrio de las Naciones Unidas para 2022 que subrayara la importancia tecnológica, científica y económica del vidrio, un material que puede facilitar un desarrollo más justo y sostenible para enfrentar los desafíos de la globalización.

La Comisión Internacional del Vidrio (ICG), con la colaboración de la Community of Glass Associations (COGA), e ICOM-Glass han promovido la Declaración del año 2022 como el Año Internacional del Vidrio por parte de Naciones Unidas (IYOG2022), aprobado por la Asamblea General de UN el 18 de mayo de 2021. Con su incomparable versatilidad y capacidades técnicas, el vidrio ha impulsado numerosos avances culturales y científicos en comunicaciones, óptica, energía y medicina, argumentos esenciales para proponer que estamos viviendo en la EDAD DEL VIDRIO.

- La fibra óptica es la base física del cambio de paradigma y la revolución de Internet y las comunicaciones.
- Las energías limpias incluyen vidrios en procesos de energía solar y eólica, y en la captura y secuestro de carbono (CCS).
- Las composiciones de Bioglass han posibilitado mejorar la medicina con su capacidad de integrarse con el hueso humano, estimular las defensas naturales para cicatrizar heridas, recuperar y crear tejidos y resolver problemas de audición y dentales.
- La óptica y la optoelectrónica han evolucionado desde la creación del telescopio de Galileo hasta el telescopio astronómico James Webb que permite retroceder hasta el propio origen del Universo.

En resumen, vidrio y sostenibilidad son conceptos inseparables. El vidrio es la herramienta invisible y transparente que nos permitirá construir un mundo más sostenible y más justo.

¡Bienvenidos a la Era del Vidrio!

## **ARQUITECTURA TEXTIL** **el uso del plástico en las membranas de uso arquitectónico.**

Arq. Roberto Santomauro

*www.sobresaliente.com - www.ims-institute.org - www.ixray-ltd.com - www.latensored.org -  
www.arqrs.com*

*Dr. Emilio Frugoni 1109 – Montevideo, Uruguay.  
tenso@sobresaliente.com*

En el caso de la construcción y de la arquitectura, además de aprender a diseñar, y a construir, hemos tenido que conocer las propiedades físico químicas de los materiales que empleamos, y del buen uso de los materiales, depende el éxito del diseño, así como su duración.

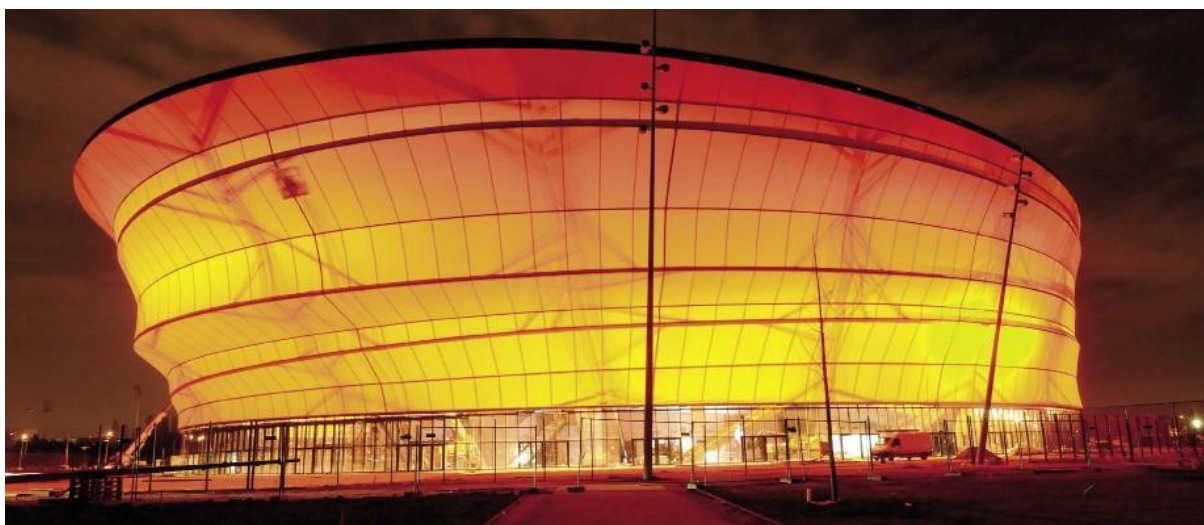
Tanto es así, que en muchos casos se pretende la casi eternidad de las construcciones, y la permanencia y en otros casos tan solo a transitoriedad, o la movilidad.

También siempre ha sido un aspecto importante, saber en cada circunstancia o región geográfica, o momento histórico, o régimen económico, cuáles son los materiales disponibles para usar.

Entonces entre las necesidades socio-culturales, la disponibilidad de materiales, la tecnología, la perennidad en el tiempo, o por el contrario la escasa duración en el tiempo de las construcciones y la movilidad o inmovilidad de las mismas, es que vemos como en cada momento histórico encontramos distintas soluciones y distintos materiales usados.

En el momento actual, (digamos de uno de los mayores despliegues tecnológicos) en la producción de materiales, ya no tanto materiales en su estado “natural” sino con distintos grados de procesamiento, aparecen nuevos desafíos que hacen pensar en otros aspectos en el uso de los materiales como ser: el aspecto energético, la huella de carbono, la reciclabilidad, la durabilidad, la sustentabilidad, etc.

En este caso nos vamos a referir en particular en el uso de los plásticos, y dentro de esos materiales en especial a las membranas para el uso arquitectónico.



Zenit Music Hall Strasburgo FTL – Canobbio - 2008

## RESÚMENES – Conferencias (15 + 5 minutos)

---

<b>Lucia Amy</b>	Structural phases of nanostructured sodium titanates obtained in different synthesis conditions: a theoretical study
<b>Aníbal Carmona</b>	Nitruración iónica de corto tiempo de aceros inoxidable. Resistencia al desgaste y a la corrosión
<b>Fernando Lanzini</b>	Descomposición espinodal en Cu-Al-Mn: simulación computacional
<b>Santiago L. Seiler</b>	Methods for evaluating mineral-collector interactions in froth flotation
<b>Caroline S. Schiavon</b>	Materiais superhidrofóbicos: a influência da estrutura superficial
<b>Matheus H. L. Lima</b>	Synthesis and characterization of Bi@DX nanoparticles for biomedical applications
<b>Lucia Amy</b>	Structural phases of nanostructured sodium titanates obtained in different synthesis conditions: a theoretical study
<b>Mayra Doldán</b>	Aceros con muy elevado contenido de Mn de uso en minería: mecanismos de respuesta al desgaste abrasivo
<b>Daiane Fernandes</b>	Compósito NaNbO <sub>3</sub> /Eu melanina: novo fotocatalizador sob luz visível
<b>Nicole Lecot</b>	Desarrollo, síntesis y caracterización de quantum dots (QDs)-nanobodies (NB) como potenciales agentes teragnósticos para cáncer
<b>Nora S. Pellegrini</b>	Estudio del comportamiento ferroeléctrico de polvos de PbZr <sub>0,52</sub> Ti <sub>0,48</sub> O <sub>3</sub> dopados con Fe <sup>3+</sup> y Nb <sup>5+</sup> para aplicaciones en piezocatálisis.
<b>Edgardo R. Benavidez</b>	Análisis de la pureza y del tamaño de grano de agregados de magnesia en la resistencia a la corrosión de ladrillos MgO-C
<b>Enzo Spera</b>	Dependencia de las Propiedades Ópticas de películas de CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> con la temperatura
<b>Romina Acevedo</b>	TIERRALAMP. Materia tierra para el diseño de objetos lumínicos.



## Structural phases of nanostructured sodium titanates obtained in different synthesis conditions: a theoretical study

Lucía Amy <sup>\*a</sup>, Lucía Campo <sup>b</sup>, Sofía Favre <sup>a</sup>, Ricardo Faccio <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, UdelaR

<sup>b</sup> Department of Material Science and Engineering, Saarland University

<sup>c</sup> Área Física & Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR.

\* lamy@fagro.edu.uy

Nanostructured sodium-based titanates are very promising materials for energy storage and photo-electronic applications. These structures can be obtained by the hydrothermal method developed by Kasuga [1,2]. Hydrothermal synthesis conditions, such as temperature, time and pH, can modify the internal structure and morphology of nanostructures obtaining: nanoparticles, nanotubes and nanorods. As it was presented in [2, 3], temperature, time and pH conditions of hydrothermal treatment influence the morphology, structural, electrical, and optical properties of these compounds. The present work is a theoretical approach based on first principles simulations to understand the structures that are formed and the vibrational and structural properties that are obtained. For the construction of the initial model, we used two paths. First, we assumed phases previously reported in literature linked to the precursors of the synthesized titanates. However, these phases fail to explain the complete behavior of the samples experimentally obtained. In search of new clues about the possible structures that can form the samples (building blocks), we perform X-ray diffraction measurements after the materials have been subjected to a high-temperature thermal process. We found that mostly hexa  $((\text{Na,H})_2\text{Ti}_6\text{O}_{13})$  and tri  $((\text{Na,H})_2\text{Ti}_3\text{O}_7)$  titanates of hydrogen or sodium are present. Calculations were made on these structures based on first principles in the bulk material and then utilized to build atomistics models on the proposed nanostructures. The results obtained from the theoretical calculations attempt to explain the properties measured as X-ray diffraction, Raman spectroscopy and optical measurements of nanostructures experimentally obtained.

[1] Kasuga, T., Hiramatsu, M., Hoson, A., Sekino, T., & Niihara, K. (1999). Titania nanotubes prepared by chemical processing. *Advanced materials*, 11(15), 1307-1311.

[2] Amy, L., Favre, S., Gau, D. L., & Faccio, R. (2021). The effect of morphology on the optical and electrical properties of sodium titanate nanostructures. *Applied Surface Science*, 555, 149610.

[3] Amy, L., Favre, S., & Faccio, R. (2022). Structural, optical, and electrical properties of proton intercalation H<sup>+</sup>/Na<sup>+</sup> phases in nanostructured titanates induced by pH during hydrothermal synthesis. *Materials Today Communications*, 104908.

## Nitruración iónica de corto tiempo de aceros inoxidable. Resistencia al desgaste y a la corrosión

Aníbal E. Carmona<sup>a</sup>, Eugenia L. Dalibón<sup>a</sup>, Raúl Charadia<sup>a</sup>, Sonia P. Brühl<sup>a,b,\*</sup>

<sup>a</sup> Grupo de Ingeniería de Superficies, Universidad Tecnológica Nacional, UT-FRCU, Ing. Pereira 676, E3264BTD Concepción del Uruguay, Argentina.

<sup>b</sup> Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET, Argentina

\*sonia@frcu.utn.edu.ar

La nitruración iónica o por plasma es un proceso termoquímico de difusión que endurece la superficie de un metal mediante la introducción de nitrógeno en la red cristalina, donde se pueden formar nitruros o generar una solución sólida. Hay un incremento de dureza mucho mayor al que se obtiene en un tratamiento térmico y aumenta en consecuencia la resistencia al desgaste. También los aceros inoxidables se pueden tratar con las técnicas asistidas por plasma y el desafío es retener o aumentar sus propiedades anticorrosivas [1-3].

En este trabajo se presentan los resultados obtenidos al nitrurar por plasma en un equipo de laboratorio, acero inoxidable austenítico AISI 316L y martensítico AISI 420. Se trabajó con la variación de parámetros como temperatura, tiempo de proceso, pre tratamiento térmico (en el caso del AISI 420), y proporciones de gases. Se redujo el tiempo tradicional de 10-15 horas a 4-6 horas. Se analizó la microestructura, con microscopía y DRX, la resistencia al desgaste con ensayos de adhesión pin on disk y la corrosión mediante ensayos potenciodinámicos en solución de NaCl al 3.5%. En la figura se observa la capa modificada en los dos tipos aceros, de 15 micrones (420) y 10 micrones (316L).

Se obtuvieron en ambos aceros una alta dureza (900-1100 HV), y se ajustaron parámetros para eliminar grietas por exceso de tensiones y no dañar la resistencia a la corrosión. En el caso del acero martensítico disminuyendo la temperatura y el tiempo de proceso, en el caso del austenítico, bajando la proporción de N<sub>2</sub> en la mezcla de gases que componen el plasma. Con una mínima pérdida de dureza se logró aumentar la resistencia al desgaste en un 100% y mejorar la resistencia la corrosión en medios clorados en el caso del austenítico y mantener la de los martensíticos.

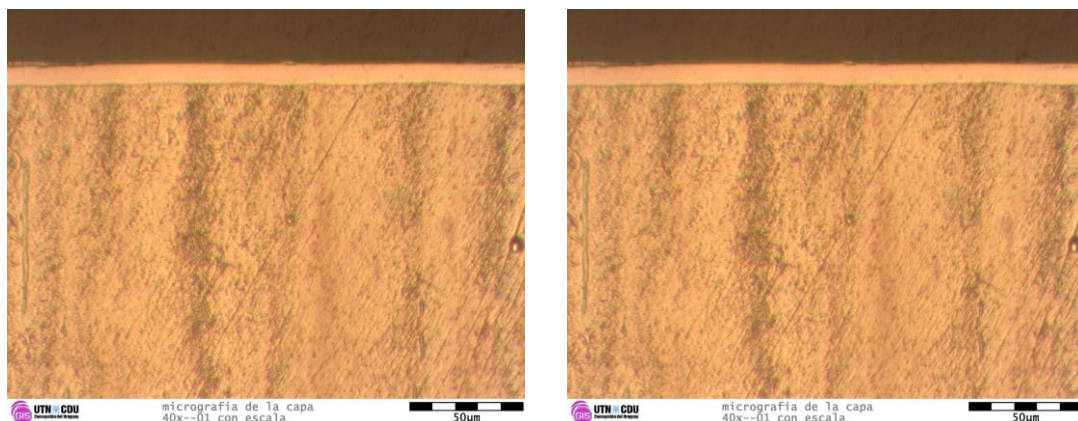


Figura 1: capa nitrurada en acero AISI 420 (izquierda) y AISI 316L (derecha)

[1] H. Dong, International Materials Reviews, 55 (2010), 65-98.

[2] Y. Li, Z. Wang, L. Wang, Applied Surface Science, 298 (2014) 243-250.

[3] Y. Li, Y. He, J. Xiu, W. Wang, Y. Zhu, B. Hu, Surface & Coatings Technology 329 (2017) 184-192.

## Descomposición espinodal en Cu-Al-Mn: simulación computacional

Facundo Arriaga<sup>a,b</sup>, Diego Velázquez<sup>a,b</sup>, Fernando Lanzini\*<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Universidad Nacional del Centro de la Prov. de Bs. As. (UNCPBA), Facultad de Cs. Exactas, Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Tandil, Bs. As., Argentina.

<sup>b</sup> Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), CABA, Argentina.

\* flanzini@ifimat.exa.unicen.edu.ar

La fase  $\beta$  de la aleación ternaria Cu-Al-Mn posee interés tecnológico debido a sus propiedades de memoria de forma, relacionada con una transformación martensítica que ocurre a bajas temperaturas. Posee además propiedades magnéticas asociadas con momentos localizados en los átomos Mn. La región de estabilidad de la fase  $\beta$  en el diagrama de fases se centra en la línea de composiciones  $\text{Cu}_3\text{Al} - \text{Cu}_2\text{AlMn}$  (que corresponde a una concentración electrónica constante  $e/a=1.5$ ). La transformación martensítica se observa para aleaciones con bajo contenido de Mn, mientras que los fenómenos magnéticos son relevantes para aleaciones más ricas en Mn y composiciones cercanas a la de Heusler,  $\text{Cu}_2\text{AlMn}$ . A composiciones intermedias se ha observado experimentalmente que ocurre una separación en dos fases a bajas temperaturas; una de estas fases tiene composición cercana a  $\text{Cu}_3\text{Al}$  y es paramagnética, mientras que la otra es similar a  $\text{Cu}_2\text{AlMn}$  y presenta orden ferromagnético [1]. En lo que refiere a la distribución atómica, ambas fases son ordenadas en primeros y segundos vecinos, configurando superestructuras del tipo  $L2_1$  ( $\text{DO}_3$ ).

La región de dos fases ha sido estudiada experimentalmente por diversos autores [2, 3]. Se ha sugerido que las interacciones magnéticas entre los átomos de Mn pueden ser una de las razones que determinan esta separación. Previamente, se han realizado modelos para describir los procesos de orden atómico y magnético a altas temperaturas [4], así como para estudiar la separación de fases promovida por magnetismo en sistemas genéricos [5].

En el presente trabajo, se implementa un modelo para describir la separación de fases  $\text{DO}_3$  (paramagnética) +  $L2_1$  (ferromagnética) en  $\beta$  Cu-Al-Mn, utilizando hamiltonianos tipo Ising y simulaciones de Montecarlo en el Conjunto Semi Gran Canónico ( $N, \{\Delta\mu_i\}, P, T$ ). Se determina un conjunto de parámetros energéticos que reproducen la región de coexistencia de fases a bajas temperaturas para composiciones cercanas a la línea  $\text{Cu}_3\text{Al} - \text{Cu}_2\text{AlMn}$ . En el modelo obtenido, las interacciones magnéticas son responsables de la separación de las fases.

[1] M. Bouchard, G. Thomas. *Acta Metall.* 23 (12) (1975) 1485–1500.

[2] J. Marcos, Ll. Mañosa, A. Planes, R. Romero, M. L. Castro. *Phil. Mag.* 84.1 (2004): 45-90.

[3] D. Velázquez, M.A.E. Chaparro, H.N. Bohnel, R. Romero, F. Lanzini. *Mat. Chem. Phys.* 246 (2020): 122793.

[4] A. Alés, F. Lanzini. *Model. Simul. Mat. Sci. Eng.* 22.8 (2014): 085007.

[5] J. Marcos, E. Vives, T. Castán. *Phys.Rev. B* 63 (22) (2001) 224418.

## Methods for evaluating mineral-collector interactions in froth flotation

Santiago L. Seiler \* <sup>a,b</sup>, Ian T. de Amores <sup>a</sup>, Gustavo A. Sánchez <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento Ingeniería de Materiales y Minas, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, 11300 Montevideo, Uruguay.*

<sup>b</sup> *Norman B. Keevil Institute of Mining Engineering, Faculty of Applied Science, University of British Columbia, 517-6350 Stores Road, Vancouver, BC, V6T 1Z4, Canada.*

\* sseiler@fing.edu.uy

Froth flotation is a solid-solid separation method applied in various industries, being its main application in the mining industry. Flotation is part of many of processes needed to supply us with several of the metallic and non-metallic elements that we use in our daily lives. In flotation, the mineral of interest is separated from the rest of the minerals present in a sample based on the selective adhesion to bubbles in a stirred tank, known as a flotation cell. Selective adhesion can be given by natural properties of the minerals, or it can be induced by the addition of chemical reagents, known as collectors. In most minerals, the addition of at least one collector is necessary. The collector interacts with the mineral surface of interest, adhering to it, and imparting an affinity to the mineral for the bubbles. In this work, the different steps involved in the development of flotation conditions for two minerals: awaruite, a native nickel-iron alloy [1] [2], and calcite, are presented. The steps are described with the aim of illustrating a general methodology for other minerals, emphasizing the multidisciplinary approach required to provide the fundamental explanations of the phenomena involved. The importance of electrochemical tools such as chronopotentiometric studies at open-circuit potential and cyclic voltammetry to the interaction mechanism between the collector and the mineral surface is discussed. The applicability of surface analysis techniques, including optical and electron microscopy, and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) is also presented. Furthermore, examples of microflotation and bench scale flotation tests for the two minerals are shown to illustrate the potential challenges that may be faced when scaling up the flotation conditions.

[1] S. Seiler, G. Sánchez, P. Bradshaw, B. Klein. Awaruite, a new large nickel resource: Physicochemical properties and their implication for mineral processing. *Minerals Engineering*. 184 (2022) 107656

[2] S. Seiler, G. Sánchez, E. Teliz, V. Díaz, P. Bradshaw, B. Klein (2022). Awaruite (Ni<sub>3</sub>Fe), a new large nickel resource: Electrochemical characterization and surface composition under flotation-related conditions. *Minerals Engineering*. 186 (2022) 107754

## Materiais superhidrofóbicos: a influência da estrutura superficial

Caroline S. Schiavon\*<sup>a</sup>, Pedro L. G. Jardim<sup>a</sup>, Mário L. Moreira<sup>a</sup>, Sérgio da S. Cava<sup>b</sup>, Cristiane R. Wienke<sup>b</sup>, André Gundel<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Física

<sup>b</sup> Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Ciências e Engenharia dos Materiais

<sup>c</sup> Universidade Federal do Pampa – Campus Bagé

\* carol\_schmechel@hotmail.com

A superhidrofobicidade é uma propriedade interessante do ponto de vista de aplicações. Materiais superhidrofóbicos apresentam a capacidade de repelir água da sua superfície, fornecendo características como anticorrosão, anticontaminação, autolimpeza, entre outras. A aplicação de revestimentos superhidrofóbicos pode aumentar a eficiência de placas solares, são de grande interesse da indústria automobilística, naval e aeronáutica como proteção anticorrosiva para metais. Além disso, na medicina podem tornar instrumentos cirúrgicos super-repelentes, dificultando a adesão de bactérias nas superfícies. Na natureza a superhidrofobicidade está presente na folha da flor de lótus e por isso também pode ser conhecida como efeito lótus. Estudos sobre essa planta, realizados por Barthlott [1], mostraram que para uma superfície alcançar a superhidrofobicidade é necessária uma baixa energia de superfície, aliada com a rugosidade superficial hierárquica, nano ou micro estruturada. Entretanto os processos de estruturação, muitas vezes, se tornam caros e complexos. Por esse motivo, o entendimento do papel da topografia na superhidrofobicidade pode facilitar o processo de produção dessas superfícies. Esse trabalho tem como objetivo analisar a influência da topografia na molhabilidade de superfícies. Para isso foram estudados filmes finos de alumina e politetrafluoretileno (PTFE). O processo de preparação dos filmes de alumina envolve a síntese via processo sol-gel do material, deposição dos filmes finos utilizando recobrimento por imersão, texturização com água fervente e diferentes tempos de exposição a fim de obter rugosidade graduada e funcionalização da superfície, buscando a baixa energia superficial. Já os filmes de PTFE foram obtidos utilizando deposição física a vapor resistiva. O processo é realizado em atmosfera de alto vácuo, o material é evaporado e as partículas de PTFE atingem o substrato de forma aleatória formando um filme de rugosidade nano estruturada. Testes de adesão ainda estão sendo realizados para os filmes de PTFE e as caracterizações estão sendo realizadas para os dois materiais. Até o momento, medidas de microscopia eletrônica de varredura, nos mostraram que foi possível obter nanoestruturas com o desbastamento químico e funcionalizar as superfícies de alumina sem influenciar na topografia [2]. Foram realizadas medidas de ângulo de contato, a fim de quantificar a molhabilidade da superfície, onde observamos que o ângulo foi elevado com o aumento do tempo de desbastamento: (t=0s -  $\theta=117,3783^\circ$ , t=6s -  $\theta=120,1020^\circ$ , t=10s -  $\theta=124,5127^\circ$ , t=16s -  $\theta=140,7943^\circ$ , t=32s -  $\theta=159,1407^\circ$ , t=64s -  $\theta=159,7147^\circ$ , t=128s -  $\theta=163,4753^\circ$  e t=512s -  $\theta=164,5290^\circ$ ). Foi possível alcançar o critério estático e dinâmico para a superhidrofobicidade ( $\theta \geq 150^\circ$  e  $H \leq 10^\circ$ ). A amostra de PTFE que apresentou boa adesão é hidrofóbica, com ângulo de contato de  $126,0330^\circ$ , a declividade r.m.s é de 0,5852. As medidas de topografia das demais amostras estão sendo realizadas, a partir de microscopia de força atômica, quando finalizadas será possível relacionar a molhabilidade da superfície com a declividade r.m.s. das estruturas superficiais, obtendo um critério topográfico geral para a obtenção da superhidrofobicidade.

[1] Wi. Barthlott; C. Neinhuis, Planta, v. 202, n. 1 (1997), 1-8.

[2] C. S. SCHIAVON, M. L. MOREIRA, S. S. CAVA, C. W. RAUBACH, P. L. G. JARDIM, Thin Solid Films, 745 (2022) 139102.

## Synthesis and characterization of Bi@DX nanoparticles for biomedical applications

Matheus H. L. Lima<sup>\*ab</sup>, Cristhiane A. Valente<sup>ab</sup>, Elisa M. N. Oliveira<sup>bc</sup>, Matheus R. Caloni<sup>b</sup>, Ricardo M. Papaléo<sup>ab</sup>

<sup>a</sup>Programa de Pós-graduação em Engenharia e Tecnologia dos Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul

<sup>b</sup>Centro Interdisciplinar de Nanociências e Micro-Nanotecnologia, Escola Politécnica, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul

<sup>c</sup>Laboratório de Novos Materiais Orgânicos e Química Forense, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

\* [Matheus.Lima94@edu.pucrs.br](mailto:Matheus.Lima94@edu.pucrs.br)

Studies involving gold, iron and hafnium nanoparticles have proved the effectiveness of the use of high-Z NPs as sensitizers in radiotherapy of different cancers.[1] Recently, bismuth nanoparticles (BiNPs) have also been considered for this purpose.[2] Therefore, it is justified to investigate synthesis routes of BiNPs for the control of size, shape and physico-chemical/stability properties. One of the strategies to guarantee the stability of BiNPs is the addition of a biocompatible compounds that can act as a coating, such as polymers, sugars, or proteins. In this work, the synthesis and characterization of BiNPs coated with the polysaccharide dextran (Bi@DX) was investigated aiming their use as a radiosensitizer NPs for glioblastoma, a malignant tumour that affect the central nervous system. The Bi@DX were prepared *in-situ* by chemical route, in aqueous solutions, according to the protocol adapted from Brown (2012).[3] Briefly, in a reactor 20 mM of bismuth nitrate was mixed with 2 M of glycine and heated at 80 °C, in constant magnetic stirring. The pH of the solution was adjusted with potassium hydroxide up to 10, followed by the addition of 1 mM dextran (Mw= 10k Da) and 275 mM of sodium borohydride. The solution gradually turned to black and the reaction was kept for more 25 minutes, until at 80 °C and stirring. The pH was readjusted to 7.5, and kept at heating and stirring for more 60 minutes. The final solution was purified by dialysis (M<sub>wco</sub>14 kDa), and then lyophilized. To control the BiNPs size, experiments were conducted with different DX concentrations (0.5mM and 2mM) and temperatures (40 °C and 0 °C), and characterized according to their size, morphology, functional chemical groups, and colloidal stability. The Bi@DX had predominantly a spherical shape and core diameter around 4.4 ± 1.2 nm. The mean size in aqueous solution was 274.0 ± 68.4 nm with a zeta potential of -5.9 ± 0.5 mV. The infrared analysis showed absorption bands characteristic of Bi and polysaccharides. The resulting UV-VIS spectrum showed the characteristic absorption bands for Bi at 541 nm. We are currently evaluating the cytotoxicity of the Bi@DX (80 °C) NPs and DNA damage in cells incubated with NPs and irradiated with X-rays from a 6 MV linear accelerator.

[1] Guerra DB, Oliveira EMN, Sonntag AR, Sbaraine P, Fay AP, Morrone FB, Papaléo RM. Sci Rep. 12, (2022), 9602

[2] Ganapathy D, Shivalingam C, Shanmugam R, Sundramoorthy AK, Murthykumar K, Pitchiah S, Sekaran S, Ramachandran SKB. Journal of Nanomaterials (2022), Article ID 4944320, 7 pages

[3] Brown AL, Goforth AM. Chem. Mater. 24, (2012), 1599

## **Aceros con muy elevado contenido de Mn de uso en minería: mecanismos de respuesta al desgaste abrasivo**

Mayra, E Doldán\*<sup>a,b</sup>, Mauricio, V Ohanian \*<sup>a</sup>, Sonia Brühl<sup>c</sup>, Martín Duarte<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> Laboratorio de Desarrollo de Nuevos Materiales, Tubacero S.A., Cnel. Raíz 949, CP12900 Montevideo, Uruguay

<sup>c</sup> Grupo de Ingeniería de Superficies, Fac. Reg. Concepción del Uruguay, Universidad Tecnológica Nacional, Ing. Pereyra 676, CP3264, Argentina

<sup>d</sup> Grupo de Ingeniería de Materiales, Inst. Tecn. Reg. Sur-Oeste, Universidad Tecnológica del Uruguay, Horacio Meriggi 905, CP60000, Paysandú, Uruguay

\* mdoldan@fing.com.uy

El acero al manganeso estándar (1,2% carbono y 12% de manganeso) es ampliamente utilizado por la industria minera en general y la industria del cemento en particular. Es conocido por su capacidad de generar endurecimiento por trabajado, así como valores interesantes de resistencia y ductilidad, y una aceptable resistencia al desgaste. Existen diferentes enfoques respecto al mecanismo de endurecimiento de estos materiales: deformación dinámica, interacción de dislocaciones con átomos de carbono y maclado o fallas por apilamiento. Si el fenómeno es producto de uno de estos mecanismos o una combinación de todos es una discusión que se mantiene. Recientemente han surgido nuevas familias de estos materiales, con aumentos considerables en el contenido de carbono y manganeso. Pueden ser encontradas aleaciones con contenidos de 18%, 20% y 24% de manganeso, acompañados de incrementos significativos del contenido de carbono. Existen escasos estudios referidos al desgaste abrasivo del acero al manganeso estándar, con una casi nula presencia de datos con respecto a aleaciones de muy alto contenido de manganeso. Es, por tanto, para estos materiales de “nueva generación”, con contenidos elevados de manganeso que se busca estudiar qué combinación de aleantes y tratamiento térmico optimiza la resistencia al desgaste abrasivo. En el presente trabajo se evalúa el mecanismo microestructural que provoca el endurecimiento por trabajado en componentes de muy alto contenido de Mn, así como la diferencia respecto del mecanismo del acero al manganeso estándar con la intención de ampliar la base de conocimiento en referencia a este fenómeno en particular. Asimismo, materiales con diferente composición y tratamiento térmico son ensayados en cuanto a su comportamiento al desgaste adhesivo y abrasivo, por medios de ensayos del tipo Pin on disk y Dry Sand-Rubber Wheel. La caracterización de las superficies de desgaste se realiza mediante la determinación de propiedades mecánicas del material, perfilometría, metalografía óptica y microscopía de barrido electrónico (SEM) de las huellas de desgaste. De esta forma son determinados los parámetros bajo los cuales esta nueva familia de componentes puede presentar ventajas significativas frente a este tipo de daño. Por otra parte, el acero al manganeso se caracteriza por una baja resistencia a la corrosión, siendo ésta su principal desventaja. Es de interés, por tanto, conocer el efecto combinado del daño por corrosión concomitante al daño abrasivo, determinar el mecanismo predominante y el carácter sinérgico de los fenómenos. Estos aspectos son evaluados mediante medidas de corriente potencial, determinación de la resistencia de polarización y ensayos de erosión-corrosión [1].

[1] Karanam, A., Prasad, A., Bichler, L. et al. In-service Performance of High-Manganese Steel Clinker Crusher Hammer. Inter Metalcast 16, 573–584 (2022).

## Compósito $\text{NaNbO}_3$ /Eu melanina: novo fotocatalisador sob luz visível

Daiane Fernandes\*<sup>a</sup>, Cristiane W. Raubach<sup>a</sup>, Mateus M. Ferrer<sup>a</sup>, Carlos F. O. Graeff<sup>b</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Pelotas/RS Brasil

<sup>b</sup> Universidade Estadual Paulista, Bauru/SP Brasil

\* daiane.fg.eng@outlook.com

As pesquisas utilizando semicondutores como fotocatalisadores vêm sendo desenvolvidas desde 1972. Neste processo fotocatalítico, o semicondutor ao absorver fótons com energia igual ou superior ao seu *band gap*, tem seus elétrons excitados da banda de valência (BV) para a banda de condução (BC), gerando pares elétron/lacuna que atuam como sítios oxidantes e redutores na sua superfície. Estes sítios, por sua vez, podem quebrar moléculas de água para produzir hidrogênio ( $\text{H}_2$ ), degradar vários poluentes em efluentes e reduzir gases nocivos. Muitos fatores influenciam a atividade dos fotocatalisadores como: tamanho da partícula, devido a relação superfície/volume e capacidade de absorção óptica, uma vez que a luz é a fonte de energia. O niobato de sódio ( $\text{NaNbO}_3$ ) é um semicondutor fotocatalisador promissor, por ser termodinamicamente estável, resistente à corrosão, não tóxico e composto por elementos amplamente disponíveis. No entanto, a forma natural de suas partículas são cubos grandes, mas pesquisas já relataram a obtenção de nanofios e nanogrãos com alta atividade fotocatalítica [1,2]. Além disso, absorve apenas a luz ultravioleta (UV), como a maioria dos fotocatalisadores, limitando seu uso. Portanto, é altamente desejável desenvolver fotocatalisadores com absorção óptica na faixa visível. A Eumelanina é um pigmento abundante na natureza, responsável pela coloração marrom-preta. Possui muitas propriedades físico-químicas, de particular interesse aqui, ampla absorção óptica que varia do UV ao infravermelho próximo e forte afinidade por metais. Diante do exposto, este trabalho teve como objetivo obter nanogrãos de  $\text{NaNbO}_3$  de forma rápida, com tamanho menor que 50 nm e produzir um compósito com Eumelanina, com atividade fotocatalítica sob luz visível. O  $\text{NaNbO}_3$  foi obtido pelo método hidrotérmico assistido por micro-ondas por 15 min a 180°C e tratamento térmico por 2 h a 800°C. A Eumelanina foi extraída de cabelo humano pelo método de isolamento ácido com HCl a 100°C por 3 h. O compósito foi preparado por sonificação e agitação durante 5 h. Foram realizadas análises de difração de raios-X, microscopia eletrônica de varredura, espectroscopia Raman, espectroscopia UV-Vis e espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X. A atividade fotocatalítica foi analisada através da degradação da Rodamina B (RhB), um corante amplamente utilizado nas indústrias, altamente tóxico e não biodegradável, sob luz visível de LED 100 W. Nanogrãos de  $\text{NaNbO}_3$  com tamanho médio de 35 nm, *band gap* de 3,60 eV e potencial de borda BV em +2,40 eV foram obtidos. A Eumelanina apresentou forma de partícula elipsoidal com eixos principais de 400 nm e 1  $\mu\text{m}$  e amplo espectro de absorção óptica. É difícil estimar o *band gap* da Eumelanina, pois os estados eletrônicos não possuem uma borda definida. A localização direta do orbital molecular desocupado mais baixo (LUMO) da Eumelanina também é difícil estimar, devido a isso, as pesquisas assumem que está próximo ao de sua análoga sintética Polidopamina, localizado em -1,40 eV. O compósito manteve a absorção de banda larga da Eumelanina, ligeiramente reduzida devido as nanopartículas de  $\text{NaNbO}_3$  decoradas em sua superfície por interações de *Van der Waals*. O  $\text{NaNbO}_3$  e a Eumelanina não apresentaram atividade fotocatalítica, enquanto o compósito degradou 96% do corante, sob luz visível. Esta atividade é explicada pelo fato do potencial do LUMO da Eumelanina ser mais eletronegativo que o da BC do  $\text{NaNbO}_3$ , permitindo a transferência de cargas fotogeradas. No presente trabalho, demonstramos a obtenção de nanogrãos de  $\text{NaNbO}_3$  em um tempo menor já relatado na literatura e preparamos um compósito por um método simples, com atividade fotocatalítica sob luz visível. Portanto, este estudo apresenta um novo fotocatalisador com elementos amplamente disponíveis e ampla absorção óptica, servindo de inspiração para o desenvolvimento de novos fotocatalisadores.

[1] D. Fernandes et al., Ceram Int., 47 (2021) 10185-10188.

[2] D. Fernandes et al., J Am Ceram Soc., 106 (2023) 399-409.



## Desarrollo, síntesis y caracterización de quantum dots (QDs)-nanobodies (NB) como potenciales agentes teragnósticos para cáncer

Nicole Lecot<sup>a\*</sup>, Angel H. Romero <sup>b</sup>, Lucia Vanrell<sup>c</sup>, Mary Lopretti <sup>a</sup>, Hugo Cerecetto<sup>b,d</sup>, Ricardo Faccio<sup>e</sup>

<sup>a</sup> Laboratorio de Técnicas Nucleares Aplicadas en Bioquímica y Biotecnología, Centro de Investigaciones Nucleares. Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> Grupo de Química Orgánica Medicinal, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

<sup>c</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad ORT, Montevideo, Uruguay.

<sup>d</sup> Laboratorio de Radiofarmacia, Centro de Investigaciones Nucleares. Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

<sup>e</sup> Área Física, DETEMA. Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

\* nlecot@fcien.edu.uy

El cáncer de mama es el cáncer más frecuente en las mujeres, con un aumento en los países en desarrollo, principalmente por el tardío diagnóstico en las últimas etapas de la enfermedad, que se caracteriza por un alto grado de zonas hipóxicas difícilmente tratables [1,2]. En este sentido, en la presente propuesta de investigación refiere a I+D de potenciales nanosistemas conteniendo fármacos de referencia para el tratamiento de tumores de mama metastásicos, involucrando el desarrollo de la nanoteragnóstica en cáncer. Es así que, recientemente el grupo trabaja con sistemas a base de Quantum Dots (QDs) con un core/shell de InP/ZnS [3,4]. Dichos QDs se han funcionalizado con cadenas poliméricas para generar regiones lipofílicas e hidrofílicas para el encapsulamiento del fármaco de referencia, docetaxel, así como con estructuras de reconocimiento, nb, a nivel de entornos tumorales [5]. Estos sistemas, con y sin docetaxel, se han sintetizado y caracterizado efectivamente utilizando técnicas tales como la espectroscopía de resonancia magnética nuclear, Microscopia Raman Confocal y microscopía electrónica de transmisión TEM. Estos presentan propiedades bien definidas como: tamaño nanométrico, buena estabilidad, buen porcentaje de encapsulamiento, tasa de liberación controlada a pH fisiológico, definidas propiedades fotofísicas de absorción y fotoemisión. Dadas las excelentes propiedades de estas nanoestructuras cargadas se ha comenzado con la evaluación *in vitro* en un modelo de cáncer de mama para su evaluación como potencial agente teragnóstico.

[1] Ferlay J, Soerjomataram I, Dikshit R, Eser S, Mathers C, Rebelo M, Parkin DM, Forman D, Bray F. Cancer incidence and mortality worldwide: sources, methods and major patterns in GLOBOCAN 2012. *Int J Cancer*. 2015;136(5):e359-86.

[2] <https://www.who.int/topics/cancer/breastcancer/es/index1.html>

[3] Zhao P, Xu Q, Tao J, Jin Z, Pan Y, Yu C, Yu Z. Near infrared quantum dots in biomedical applications: current status and future perspective. *Wiley Interdiscip Rev Nanomed Nanobiotechnol*. 2018;10(3):e1483.

[4] Wang Y, Wang Y, Chen G, Li Y, Xu W, Gong S. Quantum-Dot-Based Theranostic Micelles Conjugated with an Anti-EGFR Nanobody for Triple-Negative Breast Cancer Therapy. *ACS Appl Mater Interfaces*. 2017;9(36):30297–30305.

[5] Vanrell L , Gonzalez-techera A , Hammock BD , Gonzalez-sapienza G. Nanopeptamers for the development of small-analyte lateral flow tests with a positive readout. *Analytical Chemistry*, 2013;85(2):1177 - 1182.

## Estudio del comportamiento ferroeléctrico de polvos de $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$ dopados con $\text{Fe}^{3+}$ y $\text{Nb}^{5+}$ para aplicaciones en piezocatálisis.

Matías Perretta <sup>a</sup>, María Virginia Roldán <sup>b</sup>, Sebastián A. Barolin <sup>a,b</sup> y Nora S. Pellegrini <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Facultad de Ciencias Exactas Ingeniería y Agrimensura (FCEIA), Universidad Nacional de Rosario (UNR), Pellegrini 250, Rosario 2000, Argentina

<sup>b</sup>. Instituto de Física Rosario (IFIR- UNR-CONICET) Bv. 27 de Febrero 210 bis, Rosario 2000, Argentina.

\*pellegrini@ifir-conicet.gov.ar

La investigación relativa a los materiales piezoeléctricos capaces de recolectar energía mecánica para producir otra forma de energía, como por ejemplo química o eléctrica es continua. Actualmente los materiales piezoeléctricos de distinta composición y arquitectura se desarrollan para una variedad de aplicaciones tales como reacción de desdoblamiento de agua para producción de hidrógeno, degradación de contaminantes orgánicos e inorgánicos, etc. En este trabajo presentamos la síntesis y caracterización de polvos piezoeléctricos de  $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$  (PZT), PZT dopado con  $\text{Nb}^{5+}$  (PZTNb) y  $\text{Nb}^{5+} + \text{Fe}^{3+}$  (PZTFN), ya que la explotación de las propiedades catalíticas que presentan estos materiales ferroeléctricos, denominados como piezocatalíticos (PC), es un área de candente actualidad.

Los polvos de PZT puro y dopado se prepararon a partir de la molienda de pastillas fabricadas mediante reacción de estado sólido, por medio de la mezcla, molienda, calcinación y sinterización de óxidos de Pb, Zr, Ti, Nb y Fe. Se muestra la caracterización morfológica y estructural de los materiales preparados y una completa caracterización del comportamiento ferroeléctrico y piezoeléctrico a partir de la preparación de pastillas usando los polvos obtenidos. Se midieron los ciclos ferroeléctricos, pérdidas eléctricas y constantes dieléctricas, como así también estudios de espectroscopia de impedancias.

Finalmente, la actividad piezocatalítica se evaluó midiendo la degradación en medio acuoso del colorante Naranja de Metilo, utilizando equipos de ultrasonido como fuente de energía mecánica y cuantificando la disminución de la intensidad de absorción de UV-Vis del colorante en el tiempo por efecto de la degradación piezocatalítica de los polvos. Se utiliza cavitación ultrasónica como fuente de energía mecánica ya que aporta una fuerza conducente de gran magnitud que posibilita el seguimiento de la cinética de degradación a escala de laboratorio.

A partir de los estudios realizados se explica el origen del comportamiento piezocatalítico por migración de pares  $e^-h^+$  ya que la mayor capacidad de conversión de energía mecánica en activación química fue obtenida para el PZT dopado con Fe (PZTFN), a pesar de tener peores propiedades piezoeléctricas que el PZT con Nb (PZTNb), que resultó menos eficiente para la degradación de contaminantes orgánicos por este medio, pero ambas con mayor actividad piezocatalítica que el PZT puro.

## Análisis de la pureza y del tamaño de grano de agregados de magnesia en la resistencia a la corrosión de ladrillos MgO-C

Yamila S Lagorio <sup>a</sup>, Edgardo R Benavidez \* <sup>a</sup>, Fernando Vernilli <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Departamento Metalurgia & Centro DEYTEMA - Facultad Regional San Nicolás, Universidad Tecnológica Nacional, Colón 332, San Nicolás, Argentina*

<sup>b</sup> *Escola de Engenharia de Lorena (USP), Lorena (SP), Brasil*

\* [ebenavidez@frsn.utn.edu.ar](mailto:ebenavidez@frsn.utn.edu.ar)

La corrosión química es una de las principales causas de degradación de los materiales refractarios usados en la industria siderúrgica. En servicio, estos materiales se encuentran bajo extremas condiciones de temperaturas y exigencias mecánicas. En particular los refractarios de MgO-C están compuestos por una fase de granos gruesos (agregados) y una matriz formada por material carbonoso, antioxidantes y ligantes orgánicos [1].

El presente trabajo tiene como objetivo estudiar la degradación química de ladrillos de MgO-C por el ataque de una escoria de acería. Para esto se conformaron tres ladrillos, identificados como A, B y C, los cuales fueron formulados a partir de magnesia (MgO) de calidad electrofundida, carbono (grafito), antioxidantes (aluminio y silicio) y ligantes (resinas fenólicas). En la composición de los ladrillos solamente se modificó la calidad (pureza y tamaño de grano) de la magnesia, permaneciendo constante el resto de sus componentes. Los ladrillos, de dimensiones: 229 x 152 x 76 mm<sup>3</sup>, fueron conformados por prensado uniaxial a 135 MPa.

A través del método de inmersión, se determinaron: las densidades y porosidades aparente y real de los ladrillos conformados. El análisis estructural de los ladrillos se completa con la identificación de las fases cristalinas presentes empleando la técnica de difracción de rayos X (DRX).

El ataque químico se estableció por medio de un ensayo de corrosión estática (cup test) a 1600°C, bajo atmósfera normal durante 2 horas. Para esto se conformaron crisoles de 70 x 70 x 70 mm<sup>3</sup>, con un orificio central de 30 mm de diámetro y 40 mm de profundidad. En el orificio central se colocó una escoria utilizada en hornos de acería. La relación CaO/SiO<sub>2</sub> de la escoria es 4,2 y contiene un elevado porcentaje de Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (33,3 %), el cual es un importante agente agresivo [2].

Para estudiar los mecanismos de degradación presentes, la microestructura de las muestras pre y pos ensayo fueron observadas por medio de microscopía óptica (MO) y electrónica de barrido (MEB) con posibilidad de análisis dispersivo en energía (EDS). La intensidad del ataque químico se determinó cuantificando el área penetrada (AP) por la escoria en el fondo del crisol, para lo cual se empleó un programa para análisis de imágenes. Por otro lado, para cada ladrillo conformado, se determinó el tamaño de grano de los agregados de magnesia electrofundida, aplicando un método lineal de medición utilizando el programa sobre las imágenes obtenidas por microscopía óptica.

De acuerdo con las fases identificadas y las observaciones realizadas a lo largo del perfil de corrosión (zona de reacción escoria-refractario) se establece que el mecanismo de ataque químico de la escoria sobre el material refractario es similar en los tres ladrillos y se realiza por dos caminos: (i) la penetración de las partículas de magnesia por óxido de Fe formando magnesio-wüstita/magnesio-ferrita y (ii) la infiltración de la escoria a través de los poros abiertos.

Se concluye que la resistencia a la corrosión, en los ladrillos MgO-C estudiados, aumenta cuando los agregados de magnesia presentan un menor contenido de impurezas, una mayor relación CaO/SiO<sub>2</sub> entre los bordes de grano y se incrementa su tamaño de grano.

[1] S. Zhang, N.J. Marriott, W.E. Lee, J. Europ. Ceram. Soc. 21 (2001) 1037-1047.

[2] E. Benavidez, E. Brandaleze, L. Musante, P. Galliano, Adv. Sci. Technol., 92 (2014) 282-287.

## Dependencia de las Propiedades Ópticas de películas de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ con la temperatura.

Enzo L. Spera\*<sup>a</sup>, Daniel L. Gau<sup>a</sup>, Carlos J. Pereyra<sup>a</sup>, Mariana Berruet<sup>b</sup>, Ricardo E. Marotti<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de La República, Julio Herrera y Reissig 565, 11000 Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> División Electroquímica Aplicada, INTEMA, Facultad de Ingeniería, CONICET-Universidad Nacional de Mar del Plata, Av. Colón, 10850, B7606BWV Mar del Plata, Argentina

\* espera@fing.edu.uy

En la última década, muchos materiales con estructura  $\text{ABX}_3$ , conocidos como Perovskitas se han estudiado por sus prometedoras propiedades para su uso en dispositivos fotovoltaicos. En este trabajo, se estudia la dependencia de las propiedades ópticas (desde 290 K a 10 K) con la temperatura de películas de perovskitas con composición  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  preparadas a partir de la reacción de los precursores  $\text{PbI}_2$  y  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ .

Las medidas de absorbancia en la región visible del espectro electromagnético muestran un borde de absorción de marcada presencia excitónica cuya energía de bandgap se reduce a medida que la temperatura disminuye, contrariamente a lo que sucede en los semiconductores tetragonales convencionales. Además, se observa una transición de fase en el entorno de 145 K acompañada de un corrimiento de su borde de absorción de aproximadamente 100 meV hacia mayores energías al disminuir la temperatura (ver figura 1.a). Luego de la transición de fase, la energía del bandgap sigue la misma tendencia de reducción a medida que la temperatura disminuye. Al disminuir la temperatura, el pico excitónico se vuelve más intenso. Adicionalmente, el rápido crecimiento de la absorbancia a energías mayores al pico excitónico se explica por una no parabolicidad de la relación de dispersión de su estructura de bandas [1], además del aumento de la absorción debido a la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco.

Se observa fotoluminiscencia en la fase de baja temperatura (ver figura 1.b), no presente en la fase de alta temperatura. La intensidad de la fotoluminiscencia aumenta al disminuir la temperatura y es posible distinguir dos picos de emisión: uno a temperaturas menores que la de la transición de fase y otro (de menor energía) visible a temperaturas menores que 110 K. La dependencia de la posición en energía de estos picos con la temperatura no sigue la misma tendencia que el borde de absorción, lo que implicaría que al menos uno de ellos se debe a estados de defectos o a la localización del excitón.

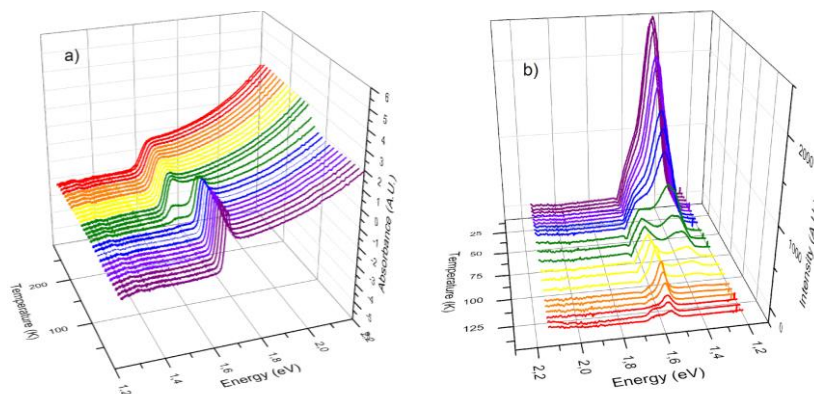


Fig.1: Espectros de (a) Absorbancia y (b) Fotoluminiscencia de película de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  a diferentes temperaturas.

[1] F. Ruf, Excitonic Effects and Bandgap Instabilities in Perovskite Solar Cells, Scientific Publishing (2020).

## TIERRALAMP

### Materia tierra para el diseño de objetos lumínicos.

Romina Acevedo Oliva<sup>a</sup>, Konstanza Navarro Ortiz<sup>\* b</sup>

<sup>a y b</sup> *Laboratorio Tierralab, Víctor Lamas 747 Concepción, Chile.*

<sup>a</sup> romina.a.oliva@gmail.com, <sup>b</sup> Knstnza@gmail.com

Cientos de poblados del mundo, conforman culturas constructivas donde es relevante el uso de la tierra como materia, esta forma de habitar presenta importantes variaciones tecnológicas que responden a la diversidad ambiental y cultural y a las diferentes características del material tierra [1]. El proyecto de investigación en torno a la materia tierra, busca poner en valor de la cultura en torno al valle del Itata en Ñuble, Chile a través del diseño de objetos utilitarios, rescatando técnicas de la arquitectura patrimonial en tierra, para el diseño contemporáneo de objetos utilitarios con materias primas locales [2]. El trabajo se ejecutó en la zona centro sur de Chile, territorio de arquitectura en tierra centenaria en torno a los procesos de vinificación mas antiguos del país. La observación de estas arquitecturas y la forma de emplazarse en el territorio nos impulsaron a abordar la materia tierra desde otra mirada y otros usos. La primera etapa del proyecto consiste en la recopilación de 20 muestras de diferentes partes del valle del Itata, muestrario versátil por su granulometría, color, textura, y composición. Una vez obtenidas las 20 muestras de 20kg cada una, comenzamos un proceso de caracterización. Desarrollamos 5 test por cada una de las muestras; Test de Decantación para saber su composición, Test de placas para saber el contenido de arena, limo y arcilla y lo expansivas de estas, test de la pastilla para saber su dureza y comportamiento al impacto del material, luego un análisis granulométrico, PH y gama cromática. Todos estos ensayos nos permitieron saber el comportamientos, estructura y tonalidades con la que contamos para comenzar el proceso de Diseño. En paralelo se desarrolló un estudio de la luz bajo 5 miradas; la luz en la Arquitectura [3], desde el Diseño de objetos [4], la luz como concepto Filosófico [5], desde el punto de vista Científico y teórico y su enfoque en el arte. Para el proceso de Diseño de las lámparas de tierra comenzamos trabajando con muestras de tierras apisonadas de los diferentes muestras y tonalidades con las que contamos. Hicimos 4 tipos de ensayos lumínicos; El primero es trabajar la materia Tierra desde el macizo, con cubos de tierras apisonadas permitiendo que la luz brille en su extensión hacia el exterior; El segundo prototipo fue comenzar a trabajar con el vacío interior permitiendo que la luz bañe la materia tierra y desde ahí proyecte la luz; El tercer prototipo de exploración fue la fisura trabajada desde el centro con un rayo de luz que inunda el espacio; y el cuarto fue explorar con plástico reciclado para explorar con otras texturas y otros materiales sustentables. El proyecto pretende sensibilizar en el uso de las materias primas locales abundantes en el planeta y que con pocos procesos permiten crear objetos de diseño pertinentes a los nuevos paradigmas del habitar Sostenible. El proyecto concluye caracterizando en una muestra con el proceso de investigación y los objetos lumínicos diseñados con Tierra Cruda.



[1] N. Jorquera, Patrimonio Chileno construido en tierra. Ediciones ARQ, 2022.

[2] M Bahamonde, Paula Mariangel Chavarría, Viñas y toneles del valle del Itata, 1ra ed. Tomé , 2016.

[3] H Plummer, la arquitectura de la luz natural, 1ra ed. Blume, 2009.

[4] M Vitta, El proyecto de la belleza, Blume 2011

[5] A Zajonc, capturar la luz, editorial atlanta, 2006

# **RESÚMENES – Pósters**

---

## **Jueves y Viernes**

**17:00 hs a 19:00 hs**

**A01 – Metalúrgica y Comportamiento Mecánico**

**A02 – Construcción y diseño industrial**

**A03 – Salud (incluye biomateriales)**

**A04 – Agroforestal**

**A05 – Catálisis**

**A06 – Energía y Sostenibilidad**

**A07 – Dispositivos electrónicos**

**A08 – Otros materiales de interés tecnológico**

# **A01 – Metalúrgica y Comportamiento Mecánico**

---

**A01– P01 al P08 – Jueves**

**A01 – P09 al P16 - Viernes**

## Estudio óptico y electroquímico del proceso de revelado metalográfico

Pablo C. Acosta\*<sup>a</sup>, Mayra E. Doldán<sup>a</sup>, Vartan M. Ohanian<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Julio Herrera y Reissig 565

\* pablo.acosta@ces.edu.uy

La metalografía es una disciplina de la ciencia de materiales, que estudia la morfología y distribución de las diferentes fases sólidas que componen un metal o aleación [1]. Dichas fases dependen de la composición química del material, pero también del “historial” de la pieza analizada y componen una estructura granular cuyos bordes se visualizan mediante el proceso corrosivo de revelado [2].

Trabajando sobre aceros de bajo y medio carbono templados, son objetivos del presente trabajo estudiar el proceso de corrosión selectiva sobre los bordes de grano de austenita. Se analizan los efectos del par ácido/contraión en la reactividad de la corrosión selectiva, así como otros procesos químicos que participan en el proceso.

Se comparan mediante los métodos de estudio óptico habituales, el empleo de revelado con ácido pícrico y con una solución de ácido sulfúrico y cloruros. Se emplean las técnicas electroquímicas de ruido electroquímico (*electrochemical noise*, EN) y la espectroscopía de impedancia electroquímica (*Electrochemistry Impedance Spectroscopy*, EIS), para estudiar el desarrollo del proceso de revelado. Las experiencias se desarrollan en condiciones de potencial libre o con potencial impuesto.

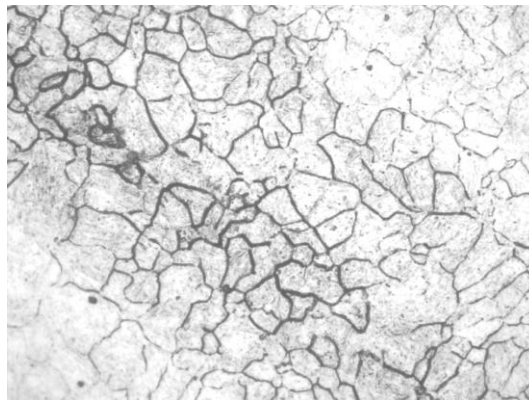


Figura 1. Microfotografía 500X de acero templado de baja aleación y medio carbono, revelado con Bechet-Beaujard en estudio de EN bajo condiciones de potencial libre

Con respecto a los resultados obtenidos, se puede observar una alta influencia del tiempo de experimento, ya que al prolongarse éste, favorece la formación de depósitos de productos de corrosión en la superficie, con el consiguiente aumento de área superficial, también la aparición de reacciones secundarias y fenómenos de transferencia de carga, de masa, formación y rompimiento de películas. Al comparar soluciones de revelado se comprobó que el uso de agente tensoactivo es determinante en el uso de Bechet-Beaujard, y se propone extender el uso de agentes tensoactivos también a la solución de revelado de sulfúrico y cloruros.

[1] Callister, W. D. Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales. Volumen I. Reverté. (2020).

[2] Ciliselli, L. Optimización de un ataque químico para el revelado del borde de grano de austenita primaria (Tesis de grado, Universidad Nacional de Mar del Plata. Facultad de Ingeniería, Argentina). (2021)



## Relación entre propiedades térmicas y mecánicas con la viscosidad de escorias usadas en el colado de aceros

Edgardo R Benavidez \* <sup>a</sup>, Leandro M Santini, Marcelo Valentini, Elena Brandaleze

<sup>a</sup> *Departamento Metalurgia y Centro DEYTEMA, Facultad Regional San Nicolás, Universidad Tecnológica Nacional (FRSN-UTN), Colón 332, San Nicolás 2900, Argentina*

\* ebenavidez@frsn.utn.du.ar

Las escorias usadas en la colada continua de aceros, conocidas como escorias de molde o polvos coladores, son polvos sintéticos basados en óxidos de silicio ( $\text{SiO}_2$ ) y calcio ( $\text{CaO}$ ), ambos óxidos representan alrededor del 70 % en peso y presentan una relación  $\text{CaO/SiO}_2$  (en peso) que varía entre 0,7 y 1,3 [1]. Estos polvos se diseñan para proporcionar una adecuada lubricación entre el acero en solidificación y el molde de cobre refrigerado. Por eso es importante conocer su viscosidad en el rango entre 1200 y 1400 °C. El contenido de sílice, es en general, del orden del 40 % por lo que durante su solidificación presenta una estructura tipo vítrea o parcialmente cristalina. La incorporación de flúor, generalmente por medio de la adición de fluorita ( $\text{CaF}_2$ ), se debe a que provoca una disminución importante de la viscosidad. Sin embargo, por razones medioambientales, actualmente se estudia el reemplazo del flúor en la formulación de estos polvos [2].

Debido a que la determinación de valores de viscosidad de estas escorias, entre 1200-1500°C, insume un extenso tiempo y ciertas dificultades experimentales, los autores han implementado una técnica para determinar la fluidez de estas escorias [3]. Por medio de esta técnica, la escoria es fundida, para luego volcarla sobre un plano inclinado de acero. La longitud de la capa vítrea o parcialmente cristalizada, obtenida por enfriamiento brusco, indica el grado de fluidez del material fundido. Esto permite, de manera rápida, conocer la fluidez, como un parámetro inverso a la viscosidad.

En el presente trabajo se determina la fluidez de diversas escorias de molde, con y sin flúor, a la temperatura de 1300°C, por medio del método del plano inclinado. Las capas sólidas obtenidas tras el enfriamiento rápido fueron estudiadas por diferentes técnicas de caracterización. El grado de fluidez en el estado fundido es relacionado con varias características del material en estado sólido, como ser: temperatura de transición vítrea ( $T_g$ ), coeficiente de expansión térmica lineal ( $\alpha$ ), capacidad calorífica a presión constante ( $C_p$ ) y microdureza Vickers ( $H_v$ ).

Los valores de  $T_g$  y  $\alpha$  fueron determinados por dilatometrías realizadas en un dilatómetro horizontal Theta-Dilatronic II. Los  $C_p$  se obtuvieron a través de un equipo de calorimetría diferencial Shimadzu, mientras que los datos de  $H_v$  fueron medidos por medio de un microdurómetro Shimadzu.

Los resultados indican que si se trabaja separadamente en dos grupos: composiciones con flúor (CF) y composiciones sin flúor (SF), se puede relacionar las propiedades térmicas y mecánicas determinadas cuando el material se encuentra en estado sólido (hasta alrededor de 600°C) con la fluidez, o la viscosidad, de estas escorias en el estado fundido (1300°C). Se realiza una interpretación a este comportamiento a partir de considerar que la viscosidad (a 1300 °C) se asocia a la intensidad en sus enlaces y al grado de complejidad de la estructura vítrea; así, a menores temperaturas, con el material en estado sólido, se debería manifestar generando distintos valores de las propiedades térmicas y mecánicas.

[1] E. Brandaleze, G. Di Gresia, L. Santini, A. Martín, E. Benavidez, Mould fluxes in the steel continuous casting process, in Science and Technology of Casting Processes., InTech, Rijeka, Croacia, 2012.

[2] E. Benavidez, L. Santini, M. Valentini, E. Brandaleze, Proc. Mater. Sc., 1 (2012), 389-396.

[3] K.C. Mills, M. Halali, H.P. Lörz, A. Kinder, R. Pomfret, B.Walker, 5th International Conference on Molten Slags, Fluxes and Salts, Sydney, Australia, 1997, 535-542.

## Inibidores de corrosão a base de lignina

Frantchescole Borges Cardoso\*<sup>a</sup>, Alice Gonçalves Osório<sup>b</sup>, Rubens Camaratta<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, R. Gomes Carneiro, 01 - Balsa, Pelotas - RS

<sup>b</sup> Universidade Federal de Pelotas, R. Gomes Carneiro, 01 - Balsa, Pelotas – RS

\*frantchescole.cardoso@gmail.com

Em 2019 o Brasil teve um gasto equivalente a 4% do PIB (R\$290 bilhões) com manutenção da corrosão [1]. Tendo isso em vista, pesquisadores vem buscando alternativas para inibir esse processo natural dos materiais metálicos. Uma dessas alternativas é a utilização da lignina para a produção de inibidores orgânicos de corrosão. A lignina é um material renovável e abundante, que está presente em diversas vegetações. Apresentou resultados animadores em recentes pesquisas quando utilizada em copolímeros [2] e, também, na sua utilização em meio aquoso [3]. No presente trabalho, a lignina soda foi depositada em meio ácido na superfície de amostras de aço baixo carbono, a fim de avaliar a resistência à corrosão através da técnica de potencial do circuito aberto (OCP). A lignina foi caracterizada através do espectrofotômetro UV-Vis Bel M51 [4]. A superfície com o filme depositado foi avaliada através de microscopias óptica e eletrônica, buscando analisar o filme formado na deposição e avaliar a superfície após o ensaio de corrosão. Para o ensaio de OCP obteve-se os resultados mostrados na figura 1a, onde é possível observar uma maior resistência à corrosão das amostras com a deposição do filme quando comparado à amostra sem o revestimento. Esse resultado indica que o revestimento a base de lignina foi depositado com sucesso na superfície da amostra e que a lignina apresenta um efeito inibidor, quando submetido a meios corrosivos. Na figura 1b é apresentada uma micrografia do filme depositado, comprovando, assim, que a deposição foi realizada de forma uniforme e compacta. Com base nesses resultados, conclui-se que a deposição de inibidores a base de lignina tem um grande potencial frente a ambientes corrosivos, tendo isso em vista busca-se uma melhor otimização dos parâmetros para resultados ainda mais expressivos.

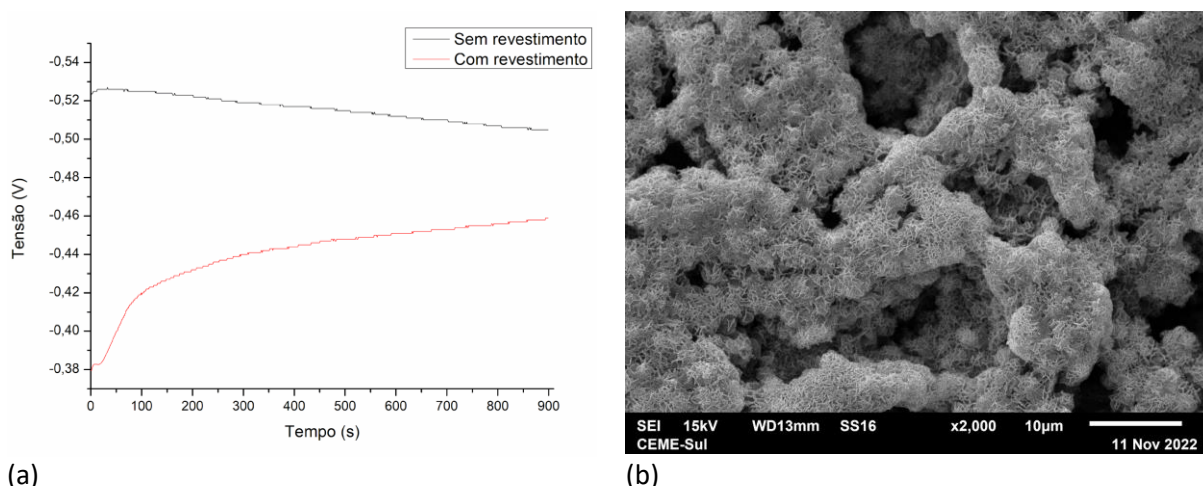


Figura 1 - Gráficos OCP (a) e Micrografia do filme depositado (b).

[1] Instituto Brasileiro de Mineração – IBRAM. (2020)

[2] C. Gao, X. Zhao, P. Fatehi, X. Dong, et al., *Industrial Crops and Products*, 168 (2021), 113585.

[3] M. Abu-Dalo, N. Al-Rawashdeh, A. Ababneh, *Desalination*, 313 (2013), 105-114.

[4] M. Jablonsky, J. Kocis, A. Hás, J. Sima, *Cellulose Chemistry and Technology*, 49 (2015), 267-274.

## O uso da casca de banana como inibidor de corrosão

Felipe Rodrigues Cassoni\*<sup>a</sup>, Amanda Aparecida Gomes<sup>b</sup>, Nubia Clasen Lourenço<sup>b</sup>, Alice Gonçalves Osório<sup>b</sup>, Rubens Camaratta<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, R. Gomes Carneiro, 01 – Balsa, Pelotas -RS

<sup>b</sup> Universidade Federal de Pelotas, R. Gomes Carneiro, 01 – Balsa, Pelotas -RS

\* cassoni\_felipe@yahoo.com

A corrosão pode ser definida como a deterioração de um material metálico, por ação física, química ou eletroquímica do meio ambiente [1], ela é uma das grandes causas de falha em metais. Portanto, sabendo desse problema, existem pesquisas que buscam alternativas para inibir esse processo de corrosão, aumentando o tempo de vida útil desses materiais. Uma alternativa que vem sendo estudada é utilizar inibidores orgânicos para retardar a corrosão. O mecanismo de atuação desses inibidores consiste na formação de uma barreira na superfície do metal, impedindo ou retardando as reações de oxirredução, tornando o meio menos agressivo ao metal [2]. Nesse trabalho, foi utilizado a casca de banana, um resíduo que se destaca por ser abundante e ser sustentável ao meio ambiente. Com isso nesse trabalho utilizou-se da casca de banana seca e macerada, colocada em água, para formar uma solução que foi utilizada na eletrodeposição em amostras de aço A36, visando a proteção da superfície contra a corrosão. As eletrodeposições foram feitas em 5 e 30 min, e com 5 e 20V, variando o polo. Após esse processo, as amostras eletrodepositadas foram expostas a um meio ácido através de ensaios de potencial de circuito aberto (OCP), para avaliar sua eficácia. A casca de banana foi caracterizada por FTIR, e os filmes foram avaliados por microscopia. Os resultados dos ensaios de OCP apresentaram certa proteção em todos os parâmetros testados, tendo seu melhor resultado em 30 min e 5V, no polo positivo. Pela micrografia das amostras, pôde ser observado que, após a deposição, a superfície foi recoberta por um filme homogêneo e uniforme, conforme visualizado na Figura 1. Esses resultados indicaram que o inibidor aderiu à superfície desse aço, atingindo o objetivo de envolver a área superficial, de forma homogênea para que consiga assim, garantir a proteção da mesma contra o meio corrosivo. Os resultados obtidos até o momento são promissores como inibidores em meio ácido e com isso, pode ser estudado para uma futura aplicação.

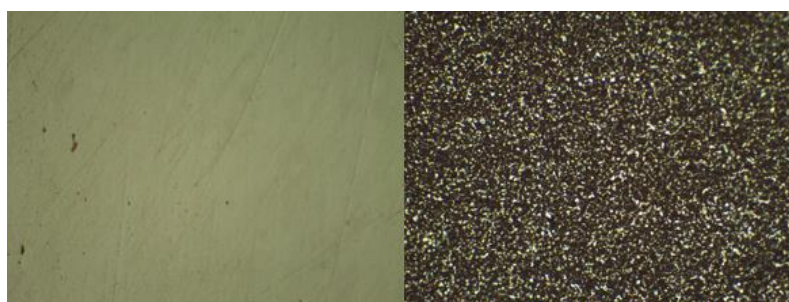


Figura 1. Amostras antes e depois da eletrodeposição.

[1] Frauches-Santos, C. et al. Revista virtual de química, v. 6, n. 2, p. 293-309, 2014.

[2] A. L. G. Eurides, A. C. S. Mayrink, B. C. Andrade, et al. Intercorr, (2018).

## **Modelos fractomecánicos para el estudio de la resistencia a fatiga de componente metálicos**

Mico Daniel Chapetti

*INTEMA, Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales  
CONICET – Universidad Nacional de Mar del Plata  
Av. Colón 10850, (7600) Mar del Plata, Argentina*

mchapetti@fi.mdp.edu.ar

El fenómeno de fatiga mecánica está presente en innumerables aplicaciones mecánicas, en componentes, dispositivos, máquinas y estructuras sometidas a carga variable en el tiempo, de amplitud constante o variable. Esta variación cíclica de carga genera un daño subcrítico que va evolucionando con los sucesivos ciclos de carga, hasta generar la falla del componente. Lo vemos fundamentalmente en aviones, trenes, camiones, autos, motos, bicicletas, máquinas alternativas, resortes, ejes rotativos, y un sinnúmero de aplicaciones donde tenemos sollicitaciones variables. En este trabajo se describe el enfoque fractomecánico para el análisis del comportamiento a fatiga de componentes metálicos. Se identifican las variables que pueden ser cuantificadas y se resume su rol en el análisis integral del fenómeno, mostrando el potencial del enfoque a la hora de predecir el comportamiento a fatiga de componentes metálicos en configuraciones complejas, lo que permite reducir incertidumbres y mejorar el conocimiento en los procesos de optimización de diseño. Finalmente se describen algunos ejemplos de aplicación sobre el análisis del comportamiento a fatiga de componentes metálicos, y la cuantificación de la influencia de defectos introducidos en su procesamiento o en servicio

## Efecto del pulido mecánico en la transformación alotrópica Ti bcc ( $\alpha$ ) -> Ti fcc en aleaciones de titanio comercialmente puras tratadas térmicamente.

Mariela E. Melia <sup>a</sup>, Elena Brandaleze <sup>a</sup>, Natalia De Vincentis <sup>b</sup>, Martina C. Avalos <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Metalurgia – DEYTEMA Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional San Nicolás, Colón 332, San Nicolás, Argentina

<sup>b</sup> Instituto de Física Rosario – Laboratorio de Microscopía Electrónica CCT Rosario, CONICET – UNR. Ocampo y Esmeralda, Rosario, Argentina

\* mmelia@frsn.utn.edu.ar

El estudio de muestras utilizando técnicas de metalografía permite analizar la microestructura de materiales brindando información valiosa sobre procesos involucrados en su fabricación, lo que facilita la predicción de causas de fallas y la evaluación de la confiabilidad de un producto.

A las técnicas convencionales de estudio de microestructura, se suman hoy técnicas de microscopía electrónica como la Microscopía de Orientación, también conocida como técnica de EBSD, la que mediante el procesamiento de datos de microestructura y orientación hace posible la obtención de información compatible y complementaria a la obtenida por microscopía óptica. Ambas técnicas requieren de la preparación de muestras conservando la estructura original de material que ha sido sometido a diferentes tipos de esfuerzos mecánicos, reacciones químicas o procesos térmicos entre otros. El uso de protocolos de preparación adecuados, que tengan como premisa la conservación de la información de origen es condición primaria para el uso de estas técnicas.

Las aleaciones de titanio comercialmente puras son muy difíciles de preparar sin deformaciones [1]. Para estos materiales es de sumo interés poseer protocolos adecuados de corte, pulido y ataque metalográfico que garanticen que lo que se observa en el análisis metalográfico refleja fehacientemente la estructura interna del material y no defectos o estructuras que corresponden a transformaciones de fases inducidas por la preparación. En particular, en este trabajo se reportan resultados obtenidos en la caracterización de una aleación de titanio comercialmente puro grado 2 tratada térmicamente a 500°C, 800°C, 900°C y 1000°C, integrando diferentes técnicas de microscopía óptica, microscopía electrónica de barrido, microscopía de orientación, difracción de rayos X y análisis térmico diferencial DTA TG. En condiciones normales de presión, esta aleación presenta una fase alfa de estructura hexagonal compacta HCP por debajo de la temperatura de transformación y fase beta cúbica centrada en el cuerpo BCC a temperaturas superiores. Sin embargo, en el transcurso de esta investigación se detectó el desarrollo de fase FCC de distribución no homogénea hacia el interior de la muestra, lo que parece indicar que la fase requiere de deformación para ser inducida. Si bien la hipótesis inicial indica que esta transformación puede haberse inducido probablemente durante el proceso de pulido, en este trabajo se analiza la dependencia entre el grado de desarrollo de dicha fase y el tratamiento térmico del material.

[1] G. Vander Voort, Metallographic preparation of titanium and its alloys, Buehler Tech-Notes 3.3 (1999).

## Caracterización de aleaciones en polvo para deposición por plasma de arco transferido (PTA)

Elena Brandaleze <sup>\*a</sup>, Enzo Deacon<sup>a</sup>, Edgardo Benavidez<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Línea de Tecnología de Procesos, Departamento Metalurgia-Centro DEYTEMA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional San Nicolás, Colón 332, 2900, San Nicolás, Argentina*

\* ebrandaleze@frsn.utn.edu.ar

La creciente demanda de materiales rígidos, resistentes y livianos a nivel industrial, en campos tan diversos como la industria aeroespacial, de la maquinaria agrícola, la energía y la construcción civil, han impulsado el desarrollo de materiales compuestos a lo largo de las últimas décadas. A tal fin, se investiga el desarrollo de materiales que logren un mejor rendimiento general en sus aplicaciones. Los tratamientos superficiales y recubrimientos, representan un punto de interés importante para el desarrollo y la investigación en la manufactura de herramientas de alta resistencia al desgaste, con el objetivo de prolongar la vida de las mismas [1].

En este trabajo, se presentan resultados de la caracterización realizada sobre dos materiales en polvo, constituidos por una mezcla de compuestos de dureza elevada acompañados por una liga metálica, con miras a ser utilizados en recubrimientos duros sobre dispositivos aplicados en herramientas de maquinarias agrícolas. En este caso las piezas finales requieren principalmente de alta resistencia mecánica (al desgaste y la abrasión) en contacto con el suelo tanto como resistencia a la corrosión.

Los recubrimientos, resultan considerablemente delgados e involucran la deposición de aleaciones que proporcionan los comportamientos requeridos. Se realizan sobre piezas constituidas por un sustrato de acero al boro y se aplican mediante la técnica de plasma por arco transferido (PTA). Dicha técnica, es un proceso térmico muy versátil, simple, automatizado y rápido para este tipo de recubrimientos [2]. El arco de plasma, debido a la alta energía, funde la superficie del metal base. Al mismo tiempo el material de aporte se inserta en el arco y también es fundido. Durante la solidificación se produce la unión entre ambos materiales. El recubrimiento desarrolla una fuerte unión entre el material de aporte y el sustrato, formando una película que protege al metal, otorgando incluso buen comportamiento frente al impacto y cargas en general.

La calidad y el comportamiento final de este tipo de recubrimientos depende de diversos factores: la composición química del polvo, la composición mineralógica, el tamaño de partícula, el comportamiento térmico, la evolución de las fases durante el enfriamiento en el proceso de deposición, entre otros factores ligados a la operación del equipo de PTA.

En este estudio se contemplan dos polvos: P1 (base Fe) y P2 (base Ni). Para establecer si poseen la granulometría adecuada, se determina la curva granulométrica empleando la tecnología de difracción láser. Estos resultados se correlacionan con observaciones de los polvos mediante microscopía óptica. También, se determina la composición química y se identifican las fases cristalinas presentes en cada material mediante difracción de rayos X. El comportamiento térmico se evalúa mediante análisis térmico diferencial DTA – TG. La evolución de las fases durante el enfriamiento del recubrimiento se predice mediante simulación termodinámica (utilizando condiciones de no equilibrio) empleando el software Fact Sage 8.1.

Los resultados del trabajo permiten verificar que ambos polvos son aptos para realizar recubrimientos por PTA a nivel industrial sobre piezas de acero al boro, para uso en la maquinaria agrícola. Además, la caracterización realizada ha proporcionado información de gran utilidad acerca del comportamiento térmico de los polvos y de la evolución de las fases durante el enfriamiento del recubrimiento.

[1] D. M. Ibrahim Sadik, Sandwik Coromant, Ed: Elanders, Sweden, (2015).

[2] A. Gatto, E. Bassoli, M. Fornari, Surface & Coatings Technology, 187 (2004) 265 – 271.

## Microestructura y tratamientos termomecánicos en una aleación Co-Ni-Al

J. P. Staneck\*<sup>a</sup>, M. Stipcich<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup>Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, FCEX, IFIMAT, Tandil, Bs. As., Argentina

<sup>b</sup>Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Tandil, Bs. As, Argentina

\*jstaneck@ifimat.exa.unicen.edu.ar

En las aleaciones ferromagnéticas con memoria de forma (FSMAs) base Co-Ni-Al [1], la fase  $\beta$  (B2) sufre una transformación martensítica a  $\beta'$  (L1<sub>0</sub>) alrededor de una temperatura  $T_0$ , y una transición ferromagnética-paramagnética a una temperatura  $T_C$ . Ambas temperaturas dependen de la composición [2,3]. La fase  $\beta$  es tan frágil que pueden generarse fisuras por acumulación de defectos en bordes de grano. Su rango de composición martensítico se ubica cercano a una región bifásica de estructura ( $\beta + \gamma$ ) dentro de un amplio rango de composición y temperatura [4,5]. Cuando la fase  $\gamma$  (A1, FCC) precipita en borde de grano, mejora significativamente la ductilidad de estas aleaciones [6,7], acomodando la deformación de la transformación, aliviando las tensiones en los granos adyacentes y evitando la propagación de fisuras, lo que mejora la transformación martensítica y los efectos de la memoria de la forma [6]. De acuerdo a la composición de la aleación, estos precipitados se generan durante los procesos termomecánicos posteriores a la fundición. Consecuentemente, un control estricto de la descomposición de la fase  $\beta$ , es imprescindible.

En este trabajo se estudia la evolución del sistema ( $\beta + \gamma$ ) - Co<sub>40</sub>Ni<sub>32</sub>Al<sub>28</sub> laminado en caliente, con tratamientos térmicos de recocido ( $T_R$ ) a 1100 °C, a 1200 °C y a 1300 °C, en función del tiempo de recocido,  $t_R$ , mediante microscopía óptica.

La aleación se fabricó en un horno de arco bajo atmósfera de Ar a partir de elementos de pureza, y se laminó en caliente a 1100 °C sin dirección preferencial, hasta una reducción del 70% obteniendo una placa de 2,6 mm de espesor.

Inmediatamente después del laminado se observó que para  $T_R=1100$  °C la microestructura no presenta cambios, ni en tamaño de grano, ni en la morfología de las fases precipitadas siendo la fracción de volumen  $\gamma$ ,  $f_v$ , de alrededor del 18%, aun para  $t_R$  largos ( $\approx 18$  h).

La estructura de granos evolucionó a  $T_R=1200$  °C, hacia una distribución homogénea por zonas, con el aumento de  $t_R$ , hasta  $t_R \approx 13$ h. La  $f_v$  disminuyó en función del  $t_R$ , alcanzando un valor mínimo de 8%. Para  $T_R=1300$  °C se observó una rápida evolución (en pocos minutos) hacia una estructura de granos homogénea, de fase  $\beta'$  (martensita), con  $\gamma$  acumulada principalmente en bordes de grano, de forma irregular. Durante tiempos  $0 \leq t_R \leq 60$  minutos, se observó que la fase  $\beta$  se distribuye sobre el borde de grano, impidiendo su crecimiento. Para  $t_R > 60$  min la microestructura evoluciona hacia un tamaño de grano mayor y regular. La  $f_v$  disminuye rápidamente para los primeros minutos de  $t_R$  y se mantiene constante para tiempos mayores, en 2%.

[1] Y. Tanaka, K. Oikawa, Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma, K. Ishida. Materials Science and Engineering A 438– 440 (2006) pp. 1054–1060.

[2] R. Kainuma, I. Ise, C.C. Jai, H. Ohtani, K. Ishida. Intermetallics 4 (1996) pp. S151-S158

[3] B. Rajini Kanth, N.V. Ramarao, A.K. Panda, R. Gopalan, A. Mitra, P.K. Mukhopadhyay. J. Alloys Compd. 491 (2010) 22–25

[4] Bu, F., Xue, X., Wang, J. et al. J Mater Sci: Mater Electron (2018) 29: 19491

[5] Y. Kimura, S. Miura, T. Suzuki, Y. Mishima. Mater. Trans. JIM 35 (1994) pp 800-807 [6] Rebecca D.Dar, Haoxue Yan, Ying Chen. Scripta Materialia 115 (2016) pp. 113-117.

[7] K. Ishida, R. Kainuma, N. Ueno, T. Nishizawa. Metall. Trans. A. 22 (1991) pp. 441-446

## Magnetismo en aleaciones Cu-Al-Mn

Diego Velázquez <sup>a, b, c</sup>, Marcos Chaparro <sup>a, d</sup>, Facundo Arriaga <sup>a, b, c</sup>, J. P. Staneck\* <sup>a, b</sup>, H. N. Böhnel <sup>e</sup>, Fernando Lanzini <sup>a, b, c</sup>

<sup>a</sup>Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), FCEX, Tandil, Bs. As., Argentina.

<sup>b</sup>Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Tandil, Bs. As., Argentina.

<sup>c</sup>Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), CABA, Argentina.

<sup>d</sup>Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Provincia de Buenos Aires (CIFICEN), Argentina

<sup>e</sup>Centro de Geociencias - UNAM, Boulevard Juriquilla No. 3001, 76230, Querétaro, Mexico

\* jstaneck@ifimat.exa.unicen.edu.ar

La aleación Cu-Al-Mn posee propiedades de memoria de forma asociadas con una transformación martensítica, así como propiedades magnéticas debidas a interacciones entre los átomos de Mn. El primer fenómeno es particularmente importante para aleaciones con bajo contenido de Mn y composiciones alrededor de Cu<sub>3</sub>Al, mientras que los efectos magnéticos son preponderantes para composiciones cercanas a Cu<sub>2</sub>AlMn. Para composiciones intermedias se observa que, a temperaturas relativamente bajas, ocurre una descomposición espinodal entre dos estructuras derivadas de la bcc con orden de largo alcance: una fase con estructura DO<sub>3</sub>, paramagnética, y composición cercana a Cu<sub>3</sub>Al y otra con orden L2<sub>1</sub>, ferromagnética, y composición alrededor de Cu<sub>2</sub>AlMn [1,2].

En este trabajo se presentan resultados sobre las propiedades magnéticas de una serie de ocho aleaciones con composiciones en este campo de dos fases. Las muestras fueron sometidas al siguiente tratamiento térmico: i) Templado desde 1073 K, reteniendo la composición homogénea y la estructura bcc correspondiente a la fase estable a alta temperatura, β, y ii) Tratamiento isotérmico (TI) a bajas temperaturas, para propiciar la separación en las dos fases antes mencionadas. Luego de este tratamiento, se realizaron determinaciones de magnetización en función de la temperatura, M(T), a velocidades de barrido constantes de 20 K/min en una balanza magnética. Se realizó un primer calentamiento hasta 1273 K, seguido por un enfriamiento hasta temperatura ambiente (1er ciclo), y un nuevo calentamiento/enfriamiento inmediatamente posterior (2do ciclo). Complementariamente, se realizaron mediciones de magnetización en función del campo aplicado, M(H) y susceptibilidad magnética en función de la frecuencia, χ(ν), antes y después de cada calentamiento.

Los resultados obtenidos muestran cambios notables en las propiedades magnéticas de las aleaciones, según su composición y el tratamiento térmico aplicado. Las muestras con TI son ferromagnéticas a temperatura ambiente, y se desmagnetizan durante el calentamiento, a temperaturas alrededor de los 600 K, de acuerdo con lo reportado anteriormente para composiciones similares [3]. Algunas de las composiciones se re-magnetizan durante el enfriamiento. Esta magnetización se debe al ordenamiento de los átomos de Mn en la subred fcc de la fase L2<sub>1</sub> [4]. De esta manera, luego del primer calentamiento, las muestras presentan diferentes comportamientos magnéticos a temperatura ambiente, dependiendo de su composición. Las curvas de M(H) indican que mientras algunas muestras se vuelven paramagnéticas, otras continúan siendo ferromagnéticas, aunque con valores de saturación diferentes. Por último, las medidas de χ(ν), evidencian una componente superparamagnética (SP) en las aleaciones luego del 1er calentamiento, posiblemente vinculada con la presencia de dominios magnéticos con orden L2<sub>1</sub>.



- [1] M. Bouchard, G. Thomas, *Acta Metall.* 23 (12) (1975) 1485–1500.
- [2] R. Kainuma, N. Satoh, X.J. Liu, I. Ohnuma, K. Ishida, *J. Alloys Compd.* 266 (1–2) (1998) 191–200.
- [3] D. Velázquez, M.A.E. Chaparro, H.N. Bohnel, R. Romero, F. Lanzini. *Mat. Chem. Phys.* 246 (2020): 122793.
- [4] A. Alés, F. Lanzini. *Model. Simul. Mat. Sci. Eng.* 22.8 (2014): 085007.

## Diseño de un dispositivo de molienda mecánica para polvos compuestos de matriz metálica

Carolina García Díaz <sup>a</sup>, Edgardo R. Benavidez \* <sup>a</sup>, José L. García <sup>b</sup>, Elena Brandaleze <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Dpto. Metalurgia & Centro DEYTEMA (UTN-FRSN), Colón 332, B2900LWH, San Nicolás, Argentina

<sup>b</sup> Sandvik Coromant R&D, Lerkrogsvägen 19, SE-126 80 Stockholm, Sweden

\* ebenavidez@frsn.utn.edu.ar

La aleación mecánica es un método basado en la molienda que permite obtener polvos de composiciones y propiedades difícilmente alcanzables por otras técnicas, como por ej. la atomización. Al ser un proceso en estado sólido, permite la síntesis de nuevas aleaciones partiendo de una mezcla inicial de elementos de diferentes temperaturas de fusión, eliminando las limitaciones asociadas a las solubilidades relativas [1]. La aleación mecánica es por lo tanto el método ideal para obtener compuestos de matriz metálica (MMC, por sus siglas en inglés *Metal Matrix Composites*). Los MMC son muy utilizados como recubrimientos de sustratos metálicos (generalmente aceros) en sectores como minería, petróleo/gas, construcción y en la agricultura para proporcionar resistencia a componentes sujetos a condiciones severas de uso y desgaste. Estos compuestos o aleaciones están formados por diversos elementos aleantes como hierro, níquel, manganeso, cromo, etc. que le confieren excelentes propiedades mecánicas [2].

En la actualidad se utilizan diversas técnicas para depositar y consolidar estos recubrimientos que incluyen a la proyección térmica [3], el recargue/soldadura [4] y otras técnicas alternativas. Dependiendo de la técnica de deposición a utilizar, se define la granulometría necesaria del MMC. En el presente trabajo, se diseñó un dispositivo de molienda mecánica para la obtención de 4 compuestos de matriz metálica (base hierro) que contienen un carburo como fase de refuerzo. Se tuvo en cuenta la dureza del material a moler para el diseño del material de fabricación del equipo. A partir de eso, se realizó un análisis bibliográfico para encontrar la mejor combinación relación peso-bolas (BPR, en inglés), relación de llenado de las jarras, tamaño de bolas, medio de molienda, volumen del medio de molienda y tiempo de molienda. La velocidad de rotación no se tomó como variable ya que el dispositivo de rotación utilizado posee una velocidad fija de 60 rpm.

Definidas las dimensiones de las jarras y medios de molienda, se procedió a la molienda de los polvos de partida (MMC-base hierro) durante 1 hora y 24 horas. Se analizó la distribución de tamaños de partículas (DTP) y las fases cristalográficas presentes (DRX) de los materiales de partida (sin moler) y de los compuestos de matriz metálica obtenidos tras la molienda. A partir de estos datos se evalúa el grado de eficiencia del equipo de molienda construido.

Finalmente, a partir de los resultados obtenidos, se determina el tiempo de molienda más apropiado para la técnica de deposición elegida.

[1] E.M. Ruiz-Navas, C.E. da Costa, F. Velasco López, J.M. Torralba Castelló, Rev. Metal., 36 (2000), 279-286.

[2] O.P. Umanskyi, M.V. Pareiko, M.S. Storozhenko, V.P. Krasovskyy, J. Superhard Mater., 39 (2017), 99-105.

[3] ASM international, Handbook of thermal spray technology, J.R. Davis, United States of America, 2004.

[4] B. Venkatesh, K. Sriker, V.S.V. Prabhakar, Proc. Mater. Sci., 10 (2015), 527-532.

## Diseño de Proceso del Tratamiento de Residuo de Acería

Mayra E Doldán \* <sup>a</sup>, Martín Duarte-Guigou<sup>b</sup>, Gastón Pereira <sup>b</sup>, Mauricio V Ohanian <sup>a</sup>

<sup>a</sup> IIQ, UDELAR, Julio Herrera y Reissig 565, Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> Viento Sur Ingeniería, Nueva Helvecia, Colonia, Uruguay

\* mdoldan@fing.edu.uy

El Polvo de Horno de Arco Eléctrico (Electric Arc Furnace Dust, EAFD) es un residuo generado en la producción de acero. El EAFD es recogido como material particulado en el sistema de tratamiento de emisiones gaseosas: ciclones, filtros o precipitadores electrostáticos. Presenta como componentes mayoritarios al Fe y Zn. El alto contenido de Zn se puede explicar debido al reciclo de chatarra de acero galvanizado. Asimismo, se encuentran presentes otros elementos en concentraciones menores: Pb, Al, Mn, Cr, Mg, Ni, Cu y Cd. Los metales pesados, principalmente Pb y Cd, presentes en el EAFD propician su clasificación como residuo peligroso, aumentando notablemente los costos de su disposición [1].

Las alternativas de tratamiento del EAFD incluyen procesos pirometalúrgicos o hidrometalúrgicos. El proceso pirometalúrgico implica la utilización de una atmósfera reductora y alta temperatura, es energéticamente intensivo y económicamente viable a gran escala de producción. El proceso hidrometalúrgico es adaptable a una menor escala de producción debido a la menor inversión inicial y al menor uso de energía. Incluye etapas en serie, con pasos intermedios de separación y corrientes de reciclaje para minimizar los costos de insumos químicos y de energía. La primera etapa es la disolución selectiva, la cual tiene como objetivo solubilizar los metales de interés comercial, en tanto, se obtiene un sólido que es necesario estabilizar y disponer. El Zn es el principal producto a valorizar del procesamiento de EAFD. Aprovechando que los compuestos de Zn tienen propiedades anfóteras, se selecciona la disolución alcalina sobre la opción ácida. La disolución alcalina del Zn tiene menor eficiencia, pero deja insolubilizados a los compuestos de Fe y otros metales con comportamiento similar. Además, la estabilización ambiental del residuo sólido resultante de la disolución, se realiza en medio alcalino lo cual supone un ahorro en reactivos. Lamentablemente, el plomo comparte el comportamiento anfótero con el Zn, por lo que la disolución del EAFD genera una solución alcalina rica en Zn y Pb. Dicha solución ingresa en una etapa de electroreducción, la cual produce como producto Zn metálico contaminado con Pb, lo cual disminuye su valor comercial. La purificación del Zn metálico puede ser lograda por diferentes vías. El lixiviado alcalino puede precipitarse con sulfuros antes de ingresar a la electrodeposición o pueden establecerse condiciones de electrodeposición selectiva, que genere depósitos ricos en Pb antes de depositar Zn [2]. Las alternativas de procesamiento generan diferentes calidades y cantidades de productos obtenidos, con costos de reactivos químicos y consumos energéticos diferentes. Con el fin de realizar el diseño químico del proceso, se plantea el costo de las alternativas de procesamiento. La alternativa que maximiza la productividad económica del proceso incluye una etapa de disolución selectiva, la electrodeposición secuencial a diferente potencial y el reúso de la corriente rica en hierro. Para dicho proceso se plantea el reúso de los flujos de reactivos y el intercambio de calor entre corrientes para maximizar la ganancia del proceso.

[1] Walburga Keglevich de Buzin, P. J.; Heck, N. C.; Faria Vilela, A. C.; J. Mater. Res. Technol., 2017, 194-202.

[2] Winand, R.; Modern Electroplating, Schlesinger; ISBN 978-0-470-16778-6, John Wiley and Sons: New Jersey, 2010; pp. 285-308.

## Estimación de flujo térmico en materiales mediante termografía y métodos numéricos

Yamilé de los A. Lara \* <sup>a,b</sup>, Ana Abreu <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565 - Montevideo - Uruguay*

<sup>b</sup> *Ingeniería Mecatrónica, UTEC - Instituto Tecnológico Regional Sur Oeste, Barrio Anglo, Fray Bentos Rio Negro.*

\* [yamile.lara@utec.edu.uy](mailto:yamile.lara@utec.edu.uy)

Se llevó a cabo un estudio para estimar los flujos térmicos en placas planas utilizando una combinación de termografía infrarroja y métodos numéricos. Los experimentos se realizaron en muestras de aluminio aplicando diferentes patrones de variación espacial y temporal de transferencia de calor, específicamente problemas de conducción de calor transitorio y permanente con variación espacial [1] [2] [3]. Se utilizó una configuración de placa única con una fuente de calor pegada y las temperaturas en las muestras se registraron utilizando una cámara termográfica de alta precisión. Se aplicaron métodos numéricos avanzados [4] [5] para analizar los datos de temperatura obtenidos y estimar los flujos térmicos en las muestras. Los resultados obtenidos se compararon con datos experimentales establecidos y se validaron, demostrando la efectividad del enfoque propuesto. Se interpretaron los resultados en términos de patrones de variación espacial y temporal de los flujos de calor, y se observaron comportamientos interesantes en los patrones de transferencia de calor, lo que permitió obtener una comprensión más profunda de los procesos de conducción de calor en la muestra. Este enfoque ofrece una metodología no invasiva para el estudio de la transferencia de calor en muestras planas delgadas, con potenciales aplicaciones en áreas de ciencias de los materiales, ingeniería mecánica y civil, así como otras disciplinas científicas y tecnológicas. Los resultados obtenidos en este estudio contribuyen al conocimiento en la caracterización de materiales por termografía infrarroja y pueden tener implicaciones significativas en la evaluación de sistemas constructivos.

[1] Incropera, F. P., & DeWitt, D. P. Introduction to Heat Transfer. John Wiley & Sons, 2017.

[2] Ozisik, M. N. Heat Conduction: Basics and Applications. Springer, 2018.

[3] Tien, C. L. Thermal Radiation Heat Transfer. CRC Press, 2018.

[4] H. S. Valberg, Applied Metal Forming: Including FEM Analysis, 1ra ed., Cambridge University Press, 2010.

[5] Z. Yang, Material Modeling in Finite Element Analysis, 1ra ed., CRC Press, 2019.

## Study of the solid-state phase transformations in a hot-rolled ferritic-bainitic steel

Matías E. Ramírez \* <sup>a</sup>, Elena Brandaleze <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Metalurgia – DEYTEMA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional San Nicolás, Colón 332, San Nicolás, Argentina*

\* E-mail: maramirez@frsn.utn.edu.ar

Advanced High Strength Steels (AHSS) are appropriate to make automobile body. These must meet a series of mechanical properties that are very important from a crash event and allow to improve passenger safety. Also, the automobile body must be agreement with the environment careful. For this reason, the fuel consumes to minimize the amount of CO<sub>2</sub> emissions must be lowered. To achieve these requirements, different types of steels are considered [1]. The first generation of AHSS involves dual-phase steels (DP), ferritic-bainitic steels (FB), complex phase steels (CP), martensitic steels (MS) and transformations induced plasticity steels (TRIP), with a low ductility due to the body-centered cubic structured ferrite matrix. On the other hand, the second generation of AHSS involves high manganese TRIP steels and twinning induced plasticity (TWIP) steels exhibiting a remarkable combination of high strength and ductility due to the face-centered cubic structured austenitic matrix. The third generation of AHSS involves duplex medium Mn TRIP steels and quenching and partitioning steels. These materials have attracted more attention in the automotive industry, because they exhibit a good tradeoff between the material cost and mechanical properties [1]. However, to achieve this performance is necessary to have a deep knowledge about thermomechanical processing. The industrial production consists of steel slab heat in a preheating furnace up to the austenitic zone and held until fully homogeneous austenite microstructure is achieved. Then steel slab is hot deformed at rolling mills and finally, the steel sheet is cooled down rapidly to obtain the adequate microstructure.

In this work a ferritic-bainitic steel (FB) was selected. To study the solid-state phase transformations, dilatometry tests were carried out, applying different cooling rates, between 0.03 and 100 °C/s. Through this technique, several data are obtained such as phase transformation temperatures, critical thermal strain, and continuous cooling curves. Given that each cooling rate different phases/constituents mix are formed, microstructural characterization is performed, and grain size and volume fraction were measured. To determine the evolution in the mechanical strength, Vickers microhardness was measured. The results obtained constitute a relevant contribution for the steelmaking industry.

[1] J. Zhao, Z. Jiang, Rolling of Advanced High Strength Steels, CRC Press – Taylor & Francis Group, Florida, 2017.

## Evaluación de arcillas activadas como materiales puzolánicos en la formulación de cemento Pórtland

Silvia J. Gómez<sup>a,b</sup>, Santiago L. Seiler<sup>\*a</sup>, Dionisio A. Laverde<sup>b</sup>, Gustavo A. Sánchez<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento Ingeniería de Materiales y Minas, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, 1130 Montevideo, Uruguay.*

<sup>b</sup> *Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería Fisicoquímicas, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27 Calle 9, 680002 Bucaramanga, Colombia.*

\* sseiler@fing.edu.uy

El empleo de materiales puzolánicos como adiciones para la formulación de cemento Pórtland constituye una alternativa de interés para reducir el consumo energético y las emisiones de dióxido de carbono asociadas a la producción del clinker. Las puzolanas son materiales inorgánicos, naturales o artificiales, que por sí solos tienen poco o ningún valor cementante. Sin embargo, al entrar en contacto con un medio húmedo y a temperatura ambiente, estos materiales reaccionan químicamente con el hidróxido de calcio libre del proceso de hidratación del cemento, formando compuestos tales como silicatos y silicoaluminatos de calcio hidratados. Estos compuestos son responsables de la mayoría de las propiedades físicas, químicas, y mecánicas de las pastas, los morteros y hormigones. Se ha informado que el tratamiento térmico de arcillas caoliníticas, puede conducir a su activación como materiales puzolánicos, fundamentalmente por la formación de metacaolinita a partir de la caolinita presente [1]. La temperatura y el tiempo del tratamiento térmico pueden condicionar las características del producto obtenido. Entre los diferentes métodos que se han propuesto para evaluar la actividad puzolánica, se encuentran el método de Frattini, que mide directamente el consumo de especies asociadas a las reacciones químicas involucradas, y el índice de resistencia mecánica, que mide el cambio en el desempeño mecánico resultante de la incorporación de los materiales puzolánicos [2]. En el presente trabajo se caracterizaron física y químicamente muestras de arcillas nacionales y de la región, y se seleccionaron las de mayor interés para realizar un diseño experimental a efectos de determinar el tratamiento térmico más adecuado para su activación como materiales puzolánicos. Se emplearon técnicas de análisis térmico, fluorescencia de rayos X (XRF), difracción de rayos X (XRD) y análisis granulométrico. Los tratamientos térmicos se realizaron en horno de laboratorio, empleando una velocidad de calentamiento de 30°C/min, y ensayando temperaturas de meseta de 600°C, 700°C y 800°C, con 30 min de duración. Los materiales obtenidos fueron caracterizados por espectrometría infrarroja (FTIR) y se evaluó su puzolanidad por el método químico de Frattini (Norma Técnica UNIT-NM 201). Adicionalmente, se determinó el índice de puzolanidad mediante la preparación de probetas de mortero y medición de la resistencia mecánica a la compresión (Norma Técnica UNIT 1035) de los productos de mayor interés. Se discuten los resultados obtenidos y su relación con las características de los materiales de partida.

[1] J. C. Restrepo Gutiérrez, O. J. Restrepo Baena, J. I. Tobón, *Dyna/Medellín*, 73, 150 (2006) 131–141.

[2] A. Tironi, M. A. Trezza, A. N. Scian, E. F. Irassar, *Cem. Concr. Compos.*, 37 (2013) 319-327.

## Relevamiento y caracterización de aleaciones metálicas utilizadas en cuchillería artesanal en Uruguay y análisis de tratamientos térmicos utilizados

Lorena Segovia<sup>a</sup>, Vacca Marcio<sup>a</sup>, Silva Mariana<sup>a</sup>

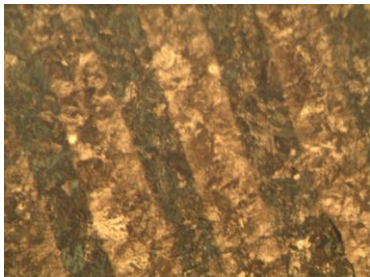
<sup>a</sup> *Departamento de metales, Instituto de Ensayo de Materiales, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay*

\*lsegovia@fing.edu.uy

En los últimos años, en Uruguay el mercado de la cuchillería artesanal ha tenido un crecimiento tanto en el aumento de maestros herreros dedicados a este rubro como en el aumento de la demanda por parte de coleccionistas u operarios de los mismos.

En este trabajo se realizó un relevamiento de los materiales utilizados por 7 maestros herreros uruguayos y se caracterizaron 59 muestras correspondientes a las distintas aleaciones metálicas utilizadas por estos herreros en la fabricación de sus piezas. Las muestras fueron caracterizadas en distintas etapas del proceso para evaluar la variación en las propiedades mecánicas y la efectividad de los tratamientos térmicos utilizados. Sobre las muestras se realizaron metalografías siguiendo las recomendaciones de los ataques químicos publicadas por ASM international [1] y B.L. Bramfitt, A.O. Benschoter [2]. Para el análisis microestructural se utilizó un microscopio MSHOT MD30. También se realizaron ensayos de dureza utilizando equipos Wilson y Otto Wolpert- Werke.

En la Figura 1 se presenta una imagen metalográfica correspondiente a un acero de damasco realizado con 66 capas intercaladas de aceros UHB 15n20 y SAE 1095, donde se aprecia la unión soldada por forja entre estos materiales. Esta imagen se obtuvo en la muestra previo al tratamiento térmico.



En otras muestras, se encontraron zonas descarburizadas y se midió con el software Image J el ancho de las mismas. Esto sucede por la migración de carbono, dejando zonas superficiales pobres en carbono con propiedades mecánicas no deseadas para el uso en cuchillería y que luego deben ser eliminadas por el herrero.

En cuanto a los ensayos de dureza, los resultados mostraron eficacia de los tratamientos realizados y en concordancia con los resultados metalográficos. Los resultados de este ensayo revisten de importancia para el maestro herrero, indicando el éxito del proceso realizado.

[1]ASM international, Metal's Handbook, Vol. 9, Estados Unidos, 2004.

[2]B.L. Bramfitt, A.O. Benschoter, Metallographer's Guide: Practice and Procedures for Irons and Steels, Estados Unidos, 2002.

## Determinación ultrasónica de propiedades de acero SAE 1020

Vacca Marcio \*<sup>a</sup>, Pérez Nicolás<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de metales, Instituto de Ensayo de Materiales, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay*

<sup>b</sup> *Instituto de Ingeniería Eléctrica, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay*

\* mvacca@fing.edu.uy

Los Ensayos No Destructivos (END) son gran parte de las tareas realizadas industrialmente para mantenimiento y monitoreo de la salud estructural [1]. Durante las últimas décadas, los ensayos ultrasónicos se desarrollaron como una herramienta eficiente para la caracterización de materiales. Las ondas acústicas, al propagarse en los materiales son afectadas por las propiedades del medio transportando información sobre las propiedades mecánicas y físicas del material [2]. Esta información suele manifestarse como cambios en la atenuación o velocidad de propagación del material.

En el presente trabajo, desarrollado dentro de la asignatura de posgrado Técnicas Experimentales de Ultrasonido (TEU), se exponen resultados de ensayos de ultrasonido para la caracterización de muestras de acero con diferentes granulometrías:

- Determinación de la dependencia de la velocidad ultrasónica con la granulometría del material a temperatura constante.
- Determinación del coeficiente de variación de la velocidad con la temperatura y su posible dependencia con el tamaño de grano.

En la figura 1 se puede apreciar el montaje experimental y una de las señales adquiridas para su posterior análisis.

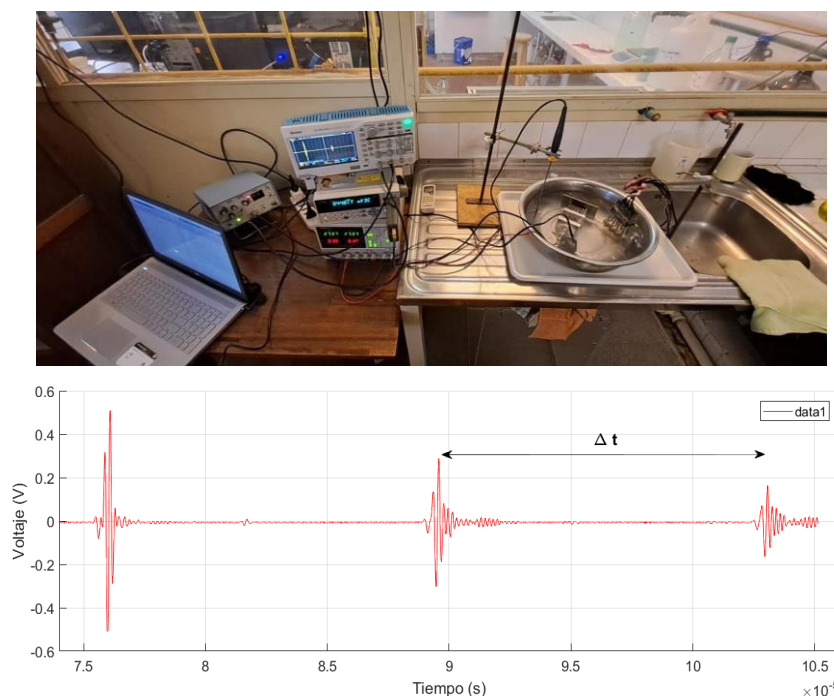


Figura 1: montaje experimental y señales adquiridas



- [1] Mridul Gupta, Muhsin Ahmad Khan, Ravi Butola & Ranganath M. Singari (2021): Advances in applications of Non-Destructive Testing (NDT): A review, *Advances in Materials and Processing Technologies*, DOI: 10.1080/2374068X.2021.1909332.
- [2] A. Badidi Boudaa, S. Lebailib, A. Benchaala, Grain size influence on ultrasonic velocities and attenuation, *NDT&E International* 36 (2003) 1–5.

# **A02 – Construcción y diseño industrial**

---

**A02 – P01 al P07 - Viernes**

## **Edificaciones ferroviarias prefabricadas**

Celeste N. Barboza Padilla<sup>1</sup>

<sup>1</sup> FADU – UdelaR. Bv. Gral. Artigas 1031, Montevideo-Uruguay.

\* arq.celestebarboza@gmail.com

El presente artículo tiene como punto de partida el trabajo final realizado en el marco del Diploma en Construcción de Obras de Arquitectura de la FADU-UdelaR, sobre las edificaciones ferroviarias prefabricadas de estructura de madera y terminación de chapa en Uruguay.

Estas edificaciones significan uno de los primeros pasos a los sistemas de construcción prefabricada en el país, cuyo auge productivo se dio de finales de siglo XIX hasta principios de siglo XX. Previamente no se contaba con estudios en profundidad ni registros sistematizados de sus características particulares.

El objetivo de este artículo es el de presentar el análisis de las características tecnológicas de los sistemas constructivos aplicados en las mismas, los materiales utilizados, elementos y componentes que hacen a estas edificaciones.

Se desarrolló una metodología en tres niveles: exploratorio, descriptivo y explicativo. Se transitó por cuatro etapas no estrictamente sucesivas que combinan métodos de observación, análisis, inducción y síntesis, en un abordaje recursivo y de retroalimentación. Se realizó un estudio de caso que involucra: 1) relevamiento primario y clasificación según tipo de construcción de los edificios principales de estación a nivel nacional, 2) estudio de los antecedentes, 3) caracterización de las peculiaridades tipológicas y constructivas de las mismas, y 4) análisis de los detalles de los componentes de cada uno de los sistemas constructivos identificados en estas edificaciones, así como sus vinculaciones.

Como resultado de esta investigación se puede decir que existió una red de empresas, principalmente británicas, que trasladaron un modo productivo que tuvo incidencia en la arquitectura nacional y marcó un antecedente importante a través de un modo de edificar novedoso para el país. Su aplicación se constató en el 30% del total de edificios de pasajeros de la red ferroviaria.

Respecto a los materiales de construcción y en particular con la madera se identificó la importancia de su rol estructural a nivel de cubiertas, muros y pisos, así como en la conformación de aberturas y terminaciones. Si bien no fue posible identificar de manera certera la madera utilizada y el grado de prefabricación de las piezas, se pudieron plantear hipótesis sobre las especies empleadas y confirmar la importación tanto de este material como de las chapas de hierro galvanizado al país.

Sobre la técnica de construcción, priman los sistemas de construcción en seco para la conformación del piso, tabiques perimetrales, tabiquería interior y cubierta. Estos últimos refieren a estructuras de entramados de piezas de madera. Del análisis de los detalles de los componentes y de sus vinculaciones, se infiere un alto nivel de estandarización de aberturas interiores y exteriores, así como del trabajo de piezas de terminación conformadas por molduras de madera.

La relevancia de los edificios prefabricados ferroviarios radica en que presentan un nuevo nivel de desarrollo de la madera que hasta ese entonces no había sido explotado, destacan por sus particularidades tecnológicas y constructivas, así como también constituyen un gran valor de referencia en las diferentes localidades en las que se encuentran.

Palabras clave: arquitectura ferroviaria, sistemas constructivos, prefabricación, madera.

## Nuevas aplicaciones para el Sistema constructivo *Steel Framing*

Alejandro Folga, Natalia Botta, Ana Fernández, Ximena Rodríguez, Melina Cabiró

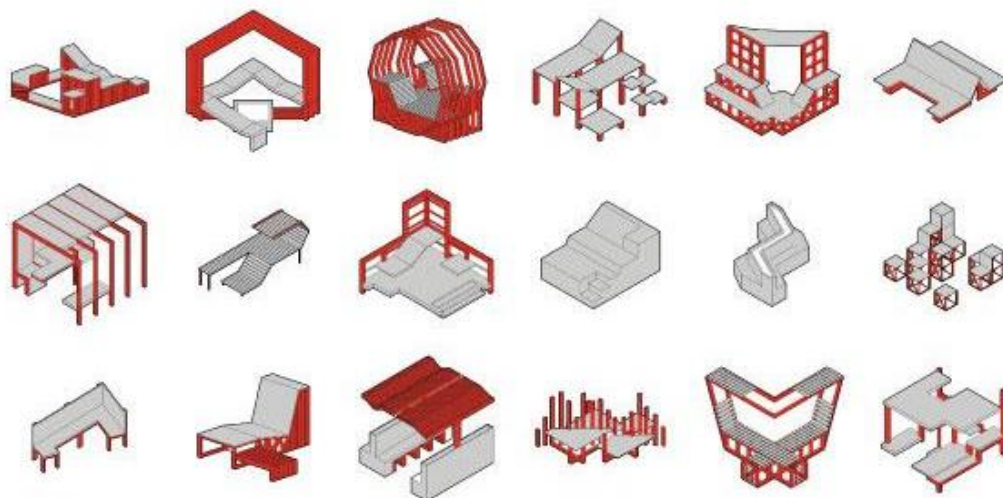
Taller Articardi / Instituto de Proyecto / Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo / Universidad de la República

alfotocopias@gmail.com

La experiencia que se presenta en esta ponencia surge de un encargo realizado al Taller Articardi de la Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo (FADU) de la Universidad de la República (UDELAR) para el desarrollo del diseño y la ejecución de un equipamiento que utilice el sistema constructivo *Steel Framing*. Este sistema se basa en una perfilería de acero galvanizado que se usa como estructura en la construcción edilicia de obra seca. Por lo tanto, el objetivo consistió en el desarrollo de nuevas aplicaciones de un sistema existente, adaptándolo a usos para los que no estaba originalmente pensado. En definitiva, el encargo implicaba realizar una innovación en los modos de aplicar una tecnología y por ello constituía un verdadero desafío proyectual.

El formato de trabajo adoptado para llevar adelante el trabajo radicó en realizar un concurso de ideas reservado a estudiantes de la carrera de Arquitectura que cursaban los primeros años en Taller Articardi. En la idea ganadora se valoró especialmente una resolución que trasciende el concepto de banco o asiento. Se trata de un equipamiento multiuso en donde un único plano de madera se inclina y se pliega en distintos sectores para generar respaldos y superficies de apoyo que permiten que las personas puedan recostarse, sentarse enfrentadas o incluso que algunos planos sean utilizados como mesa de trabajo.

La estrategia para materializar el diseño tuvo en cuenta las condicionantes derivadas de las limitantes temporales (una sola jornada de montaje), la capacidad de los encargados del montaje (estudiantes de UTU), la sistematización constructiva (racionalización en el uso de los materiales), y la estabilidad de la estructura generada (debía ser segura para su uso en espacios públicos). Los tres prototipos generados a partir de esta experiencia actualmente están en uso en espacios exteriores de instituciones de enseñanza pública y en una cooperativa del barrio Casabó.



## Radionucleidos naturales en materiales de construcción utilizados en Uruguay

A. Noguera<sup>a</sup>, R. Reboulaz, H. Bentos Pereira, L. Fornaro

<sup>a</sup> Departamento de Desarrollo Tecnológico, Centro Universitario Regional del Este, Universidad de la República, Ruta 9 y Ruta 15, 27000, Rocha, Uruguay

\* anoguera@cure.edu.uy

Tanto el <sup>40</sup>K como los radionucleidos de las series de <sup>238</sup>U y <sup>232</sup>Th están presentes en la corteza terrestre, y por lo tanto son componentes de los materiales de construcción que se elaboran a partir de ella. La radiactividad de los materiales de construcción junto a la radiactividad proveniente del suelo son las mayores fuentes de exposición de la población a la radiación ionizante. La exposición de la población debida a los materiales de construcción puede darse por exposición directa a la radiación gamma (exposición externa) proveniente de los Radionucleidos naturales de las series de <sup>226</sup>Ra, <sup>232</sup>Th y al <sup>40</sup>K -y por contaminación interna por inhalación del <sup>222</sup>Rn y sus productos de desintegración.

En este trabajo reportamos, por primera vez, la actividad específica de <sup>226</sup>Ra, <sup>232</sup>Th y <sup>40</sup>K en diferentes materiales de construcción comercializados en Uruguay. Cemento Portland, mezclas de cemento preparadas, cal, yesos, ladrillos, ticholos, bloques y recubrimientos cerámicos fueron adquiridos en el mercado, cuarteados, molidos y almacenados durante cuatro semanas en recipientes con geometría Marinelli, de manera de alcanzar el equilibrio secular entre el <sup>226</sup>Ra y sus productos de decaimiento. La actividad específica de <sup>226</sup>Ra, <sup>232</sup>Th y <sup>40</sup>K fue cuantificada por espectrometría gamma mediante un sistema de espectrometría gamma con detector de germanio de alta pureza (HPGe) ORTEC- AMETEK, GMX35P4-76-RB, encontrándose los rangos de actividades específicas que se muestran en la Tabla 1. Para evaluar el exceso de radiación gamma debido al uso de los materiales de construcción se utilizó el índice de concentración de actividad (I) según la normativa Europea, dado que no existe normativa nacional.

Material	<sup>226</sup> Ra (Bq.kg <sup>-1</sup> )	<sup>232</sup> Th(Bq.kg <sup>-1</sup> )	<sup>40</sup> K (Bq.kg <sup>-1</sup> )	I (recomendado < 1)
Cementos y mezclas cementicias	< LD – 38.8	< LD – 15.0	148-384	< LD – 0.32
Elementos estructurales (ladrillos, bloques y ticholos)	8.8 -45.7	23.5 – 49.5	210-518	0.32-0.57
Yesos y placas	3.5-13.6	4.6-12.1	43.7-296	0.024-0.37
Recubrimientos (cerámicos y porcelanatos)	34.6-69.2	50.3-93.0	700-800	0.64-0.96

**Tabla 1:** Actividades específicas de <sup>226</sup>Ra, <sup>232</sup>Th y <sup>40</sup>K e índice de concentración de actividad (I) para distintos materiales disponibles en el mercado Uruguayo. LD = límite de detección.

Un valor que supere el valor recomendado - I = 1- implica que el nivel de referencia de dosis equivalente efectiva anual de 1 mSv.yr<sup>-1</sup> ha sido excedido, y que no es recomendable usar ese material para construcción de viviendas, aunque puede ser utilizado con otros fines. Si bien no se han evaluado hasta el momento materiales cuyo índice de concentración de actividad supere el valor recomendado, mayores estudios se hacen necesarios para garantizar el uso radiológicamente seguro de los materiales de construcción en Uruguay, y para establecer las normas pertinentes.

**Biomateriales y diseño industrial. Desarrollo de materiales biobasados a partir de subproductos agroindustriales de Argentina.**

Camila M. Picco \*<sup>a</sup> Silvina Regenhardt <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral - Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)- Argentina.*

\* cpicco@fiq.unl.edu.ar

La generación masiva de plásticos se ha vuelto un problema a nivel mundial, por lo cual se están desarrollando alternativas. Los biomateriales son un potencial sustituto para el plástico. Los mismos se pueden desarrollar a partir del cultivo y de la recuperación de subproductos agroindustriales. El presente trabajo tiene como fin comentar lo que se está investigando en el marco del trabajo del doctorado en Ingeniería mención materiales.

Estamos en busca de desarrollar biomateriales con residuos agroindustriales del Litoral Argentino con buenas propiedades para el desarrollo de productos de diseño, material para la construcción y embalaje. Se propone generar productos que reemplacen materiales plásticos y colaboren con el medio ambiente bajo un modelo de economía circular, es decir, aprovechando materias primas. Manzini define el trabajo del diseño como “la creación de puentes (bridges) entre la técnica y la sociedad” [1]. Para generar un aporte a la innovación social en busca de la sostenibilidad se va a trabajar en el desarrollo de una nueva forma de producción: La biofabricación, que se define como la aplicación de la biotecnología para cultivar y hacer crecer los objetos en lugar de manufacturarlos.

Se realizaron muestras a partir del cultivo de micelio de hongos y sustratos combinando fibra de cáñamo y cáscara de maní obteniendo cuatro formulaciones. Asimismo se realizaron muestras con celulosa bacteriana y un biomaterial a base de almidón de maíz. Las muestras más exitosas (colonizadas y no contaminadas) fueron sometidas a ensayos. A las formulaciones de micelio se las comparó con placas de poliestireno expandido (EPS). Si bien aún quedan pruebas por realizar consideramos que los biomateriales desarrollados tienen potencial de aplicación. Poseen baja densidad y recuperan su aspecto y dimensiones al ser sometidas a humedad saturada. Se obtuvo un valor promedio de densidad de 0,23 g/cm<sup>3</sup>, lo cual es un buen valor ya que se encuentra en el rango de densidades de placas aislantes (0,16 - 0,5 g/cm<sup>3</sup>) [2]. Son rígidas y biodegradables, estas características las convierten en una alternativa ecológica a los materiales de embalaje y aislamiento a base de petróleo. A las demás muestras aún se les están haciendo pruebas para lograr espesores constantes y se están probando opciones de procesamiento para posibles usos en la industria textil. Se realizó un workshop en la cátedra de materiales y procesos de diseño Industrial en la Universidad Nacional del Litoral para crear dichos materiales con el objetivo de realizar prototipos de productos y testeo de experiencia de usuario utilizando la metodología Material Driven Design (MDD), que es un método que ayuda a los diseñadores a comprender y diseñar la experiencia que el usuario tiene con y a través de los materiales. [3] También se realizó un estudio de caracterización de los materiales. [4]

[1] Manzini, E. (2008). Cuando todos diseñan. Milán, Italia: Experimenta.

[2] Celano, J. (2010). Paneles termo-acústicos a base de residuos de madera.

[3] Karana, E., Barati, B., Rognoli, V., Van der Laan, A. Z. (2015 b), Material Driven Design (MDD): a method to design for material experiences, International Journal of Design, 9(2), 35-54.

[4] Morel, K. P. N. (2002). Consumers' reactions to ambiguous product information: The categorization of hybrid products.

**Interacción academia – sector productivo en la industria de la  
Construcción  
En busca de un espacio de interacción concreto**

Livia Arizaga<sup>a</sup>, Santiago Pons<sup>b</sup>, Alma Varela<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, Udelar, Av. Gral. Flores 2124, Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> Instituto de Proyecto, Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo, Bv. Gral. Artigas 1031, Montevideo, Uruguay

\* [arq.santiagopons@gmail.com](mailto:arq.santiagopons@gmail.com)

En el sector productivo de la construcción en Uruguay subsiste una deficiencia en el conocimiento cabal referente a la Química de los materiales que se utilizan. Comenzando con la escasez en temas de Química en la currícula de asignaturas que forman a los profesionales que terminan utilizando estos materiales. Y siguiendo con la casi nula oferta de cursos de educación permanente y posgrado que permitan formarse en estos temas. Un refuerzo en estos asuntos requiere necesariamente un enfoque interdisciplinario en el que converjan, al menos, especialistas en Química, Ingeniería, Arquitectura y Diseño industrial.

Teniendo en cuenta este panorama se realizó en diciembre de 2022 una mesa redonda con diversos actores nacionales del sector productivo de la industria de la construcción y de la academia, de forma de iniciar un debate sobre la temática. Se buscó extraer cuáles serían las perspectivas para alcanzar un trabajo conjunto para potenciar un uso consciente de los materiales de construcción con énfasis en sus características químicas, permitiendo un mejor aprovechamiento de los recursos y un trabajo más sustentable. Se presentarán en este trabajo los resultados de dicha mesa redonda, de la que surge que es necesaria una interacción más sostenida entre ambos sectores -y entre disciplinas-, para potenciar la innovación, la transversalidad y la sustentabilidad y economía circular.

## Estudio de la interfaz fibra-matriz en compuestos de matriz cementicia reforzada con fibras metálicas

Ilina Rodríguez Viacava \* <sup>a</sup>, Gemma Rodríguez de Sensale<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Ensayo de Materiales (IEM), Facultad de Ingeniería (UdelaR)

<sup>b</sup> Instituto de Tecnologías (IT), Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo (UdelaR)

\* E-mail: irodriguez@fing.edu.uy

El Hormigón Reforzado con Fibras (HRF) va conquistando nuevos campos de aplicación en obras civiles. Las fibras distribuidas aleatoriamente en la matriz del hormigón permiten un mejor control de la fisuración, y ello condiciona fuertemente la calidad de la unión que se da entre la fibra y la matriz (“interfaz F-M”). Cuando un material compuesto se somete a determinadas cargas externas, la matriz es quien inicialmente opone resistencia hasta alcanzar un determinado punto (carga-pico), superada esta instancia la carga es transferida a las fibras a través de la interfaz F-M. Para diferentes autores el mecanismo de unión entre la fibra y la matriz circundante involucra básicamente tres instancias: adhesión o enlace químico, fricción, y anclaje mecánico de la fibra. Esta primera instancia de “enlace químico” está vinculada con las propiedades de la interfaz F-M. Una vez superado el “enlace químico” entre F-M, se produce la desunión de la fibra, y allí entran en juego las siguientes instancias “de fricción” y/o “anclaje mecánico de la fibra” con la matriz, lo cual está gobernado principalmente por la geometría y tratamiento superficial de la fibra. En consecuencia, lograr una unión de interfaz F-M fuerte, repercute en el desempeño mecánico del material compuesto (HRF). El objetivo del trabajo es analizar la interfaz fibra-matriz (F-M) en compuestos de matriz cementicia reforzados con fibras metálicas para identificar los parámetros y propiedades que gobiernan la unión entre ambos materiales.

Se utilizó como matriz cementicia un microhormigón al cual se le incorporaron diferentes contenidos de microfibras de polipropileno (0,05%; 0,10% y 0,15% del volumen) y macrofibras de acero con extremo con gancho.

En cuanto a la **matriz cementicia**, se determinó la consistencia de las mezclas en estado fresco (IRAM 1570), buscando una consistencia fluida con extendidos de  $220 \pm 20$  mm. En estado endurecido se evaluó la resistencia a flexión (6,7 MPa) y compresión (42,4 MPa) a los 28 días de edad (UNIT- ISO 679). El **análisis de los mecanismos de unión de la interfaz F-M** se abordó mediante la evaluación del comportamiento mecánico de fibras con gancho a través del ensayo de pullout, que consiste en el arrancamiento de la fibra metálica de la matriz cementicia. A través del análisis de la relación entre la carga de pullout vs. el desplazamiento de la fibra, se pueden analizar los diferentes mecanismos de unión de la interfaz F-M. En este trabajo se adoptaron dos configuraciones de ensayo diferentes: fibra aislada (D1) y un conjunto de 16 fibras (D2).

El modo de falla en todos los ensayos por pullout fue por extracción de la/s fibra/s, es decir que el elemento que falló fue la interfaz F-M. Se reconocieron los diferentes mecanismos de unión de la interfaz F-M a través del análisis de la relación entre la carga de pullout vs. el desplazamiento de la/s fibra/s, identificándose las mismas 5 etapas en ambos dispositivos (D1 y D2): (1) etapa elástica y de desprendimiento parcial de la fibra (prevalece adhesión química); (2) primera etapa de deformación plástica del gancho junto con la ruptura de la matriz que lo rodea (prevalece anclaje mecánico); (3) segunda etapa de deformación plástica del gancho (prevalece anclaje mecánico); (4) etapa híbrida deformación-deslizamiento; (5) etapa de deslizamiento por fricción. Los resultados obtenidos con el dispositivo 2 presentaron baja dispersión en sus valores (no así con el dispositivo 1), observándose un aumento en los valores promedio de carga máxima de adherencia química y anclaje mecánico para la mezcla con 0,15% de microfibras poliméricas. La presencia de las microfibras podría colaborar en el “cosido” de microfisuras que aparecen en la interfaz F-M y en la matriz alrededor del gancho.



## ¿Cómo una falla de la impermeabilización en azoteas influye en la durabilidad de estructuras de hormigón? Estudio de casos.

María S. Sánchez Sarabia<sup>a</sup>, Luis Fernández Luco<sup>b</sup>, Livia Arizaga<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Estudio CASA, Garibaldi 2678, Montevideo Uruguay

<sup>b</sup> Facultad de Ingeniería - Universidad de Buenos Aires

<sup>c</sup> Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelAR, Av. Gral Flores 2124, Montevideo, Uruguay

\* msabrinasantchez@gmail.com

La adopción de un enfoque holístico a través de un análisis en ciclo de vida permite identificar los requisitos funcionales, entre los que aparecen la durabilidad e integridad de las construcciones. Esto implica que se contempla la adopción de medidas que condicionan esos requisitos funcionales desde el diseño constructivo, la selección de materiales, la construcción propiamente dicha, el período de uso y mantenimiento e incluso podría abarcar su fin de vida.

De este modo, es posible definir de manera precisa las actuaciones y encontrar la solución que optimiza la conformidad con requisitos funcionales en todo el ciclo de vida y no operar con consideraciones limitadas al costo inicial.

Definidas las funcionalidades, se analizan los factores que inciden en cada una; por ejemplo, para la durabilidad, se debe conocer los procesos que conducen a la aparición de patologías, factores externos e intrínsecos, evolución más probable y consecuencias, para identificar las distintas actuaciones.

En este trabajo se presenta una metodología general, que se aplica a tres casos de estudio. A partir de la identificación de lesiones, haciendo un recorrido inverso, pasando por una serie de pruebas y/o estudios se puede llegar a una probable conclusión de la aparición de dichas patologías. [1]

Es a partir de los casos estudiados, donde podemos concluir que el diseño, la selección de materiales y los procedimientos constructivos son condicionantes del buen desempeño y la durabilidad pretendida, reduciendo las tareas de mantenimiento. Asimismo, se muestra cómo existen consecuencias derivadas de la falta de cumplimiento de un requisito funcional, la estanqueidad, que podría tener consecuencias sobre el hormigón estructural.



(Fig. 1.) Consecuencia de falla en un requisito funcional (estanqueidad) para losa de hormigón armado

[1], Broto, C. (2005). *Enciclopedia Broto de patologías de la construcción* (1.ª ed.). Barcelona: Barcelona : Links International. Barcelona: Barcelona : Links International.

## Paneles aislantes de barbotina y fibras naturales, investigación aplicada.

Félix Jové-Sandoval\*<sup>a</sup>, Eva M. García-Baños<sup>a</sup>, M. Mar Barbero-Barrera<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Construcciones Arquitectónicas, ETSAVa, Universidad de Valladolid.  
Avenida de Salamanca 18, 47014 Valladolid (España)*

<sup>b</sup> *Laboratorio de Materiales de Construcción (MCLab) ETSAVa, Universidad de Valladolid.  
Avenida de Salamanca 18, 47014 Valladolid (España)*

<sup>b</sup> *Departamento de Construcción y Tecnología en Arquitectura, ETSAM, Universidad Politécnica de Madrid,  
Avenida Juan de Herrera 4, 28040 Madrid (España)*

\* fjove@arqu.uva.es

La incorporación de materiales naturales en la construcción de edificios es un reto inaplazable frente al proceso de cambio climático al que está sometido el planeta. Materiales de bajo impacto ambiental, de emisiones de CO<sub>2</sub> casi nulas y km0 son cada vez más requeridos en la industria de la construcción. Con el objeto de cumplir los nuevos criterios de sostenibilidad ambiental numerosas investigaciones relacionadas con los materiales naturales ligados a tecnologías no convencionales se están desarrollando. En esa línea de trabajo, los materiales *composite* en base tierra y fibras naturales están experimentando un creciente interés.

El presente artículo muestra los resultados de la investigación llevada a cabo en el Laboratorio de Materiales de Construcción (MCLab) de la Escuela Técnica Superior de Arquitectura de la Universidad de Valladolid. Diferentes paneles aligerados de fibras vegetales y barbotina han sido fabricados y ensayados siguiendo la norma UNE-EN ISO 8990 (Determinación de propiedades de transmisión térmica en régimen estacionario. Métodos de caja caliente guardada y calibrada). El objeto de la investigación es determinar los valores de conductividad térmica de diferentes paneles (Fig. 1 a, b) con el objeto de ser utilizado como paneles aislantes en la mejora del aislamiento térmico de edificios construidos.

Las conclusiones obtenidas indican que los paneles aislantes mejoran considerablemente los valores de transmitancia térmica del muro objeto ensayado. Los paneles fueron fabricados con el mismo suelo de referencia (AMY/GT), en dosificación y grado de humedad constante, para diferentes fibras vegetales (*fibers A, B, C*) y longitud variable (*length 1, 2, 3*). Los paneles ensayados tienen formato idéntico y espesor variable (35mm, 70mm, 90mm). Se han encontrado notables diferencias entre unos y otros paneles, aportando datos para la fabricación del panel estándar más favorable. La caracterización de los paneles y los diferentes valores de conductividad térmica encontrados entre ellos son objeto de discusión para la elaboración de conclusiones del artículo.

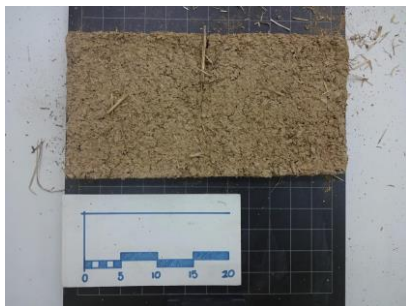


Figura 1 a (Muestra BPA2).

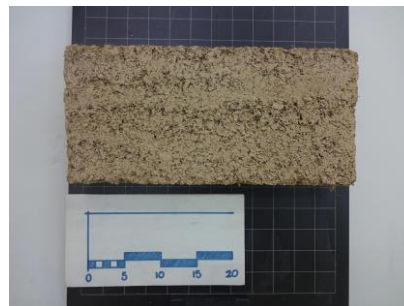


Figura 1 b (Muestra BPB2).

## **A03 – Salud (incluye biomateriales)**

---

**A03 – P01 al P06 – Jueves**

**A03 – P07 al P11 - Viernes**

## Preparação e caracterização de filmes de látex de borracha natural contendo própolis vermelha e cobre para aplicações biomédicas

Andressa R. Bystronski \* <sup>a</sup>, Janaina S. Crespo <sup>a,b</sup>, César Aguzzoli <sup>a</sup>, Nayrim B. Guerra <sup>a</sup>, Marcelo Giovanela <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área do Conhecimento de Ciências Exatas e Engenharias, Universidade de Caxias do Sul, Rua Francisco Getúlio Vargas, 1130, Caxias do Sul, 95070-560, RS, Brazil

<sup>b</sup> Materials Research Institute, Technological University of the Shannon: Midlands Midwest, Athlone, Co. Westmeath, Ireland

\* arbystronski@ucs.br

A cicatrização de feridas apresenta resistência e tolerância a vários antimicrobianos tópicos utilizados convencionalmente para essa finalidade [1]. Nesse contexto, o desenvolvimento de curativos com materiais que possuem propriedades angiogênicas e bactericidas é desejável, visando tratar infecções por mais tempo e de forma local [2]. No nosso estudo foram preparados filmes de látex de borracha natural (LBN) e própolis vermelha pelo método de *solving cast*. Os filmes obtidos foram inicialmente secos em estufa por 24 h a 65 °C e, em seguida, foi realizada deposição de cobre por *sputtering* nos tempos de 5, 10, 15, 20, 30 e 40 s. Um grupo de amostras foi acondicionado em um dessecador, enquanto o segundo foi colocado em bancada de laboratório em contato com ar atmosférico. As membranas foram então caracterizadas química e biologicamente, utilizando a bactéria *Escherichia coli*. De modo geral, os resultados indicaram propriedade bacteriostática dos filmes a partir de 10 s de deposição de cobre, com uma melhor atividade para os filmes que permaneceram no dessecador. Os filmes acondicionados em bancada, por sua vez, reagiram com o oxigênio atmosférico e produziram óxidos de cobre na sua superfície, enquanto os filmes mantidos em dessecador apresentaram apenas cobre metálico, evidenciando maior atividade bacteriostática. O conjunto de resultados preliminares indica que os filmes de LBN/própolis/cobre podem ser considerados uma alternativa frente aos curativos de feridas tradicionais, mas outros estudos (principalmente de caráter biológico) são ainda necessários.

[1] M.M. Mihai *et al.*, Int. J. Mol. Sci., 19 (2018) 1179.

[2] J.M. Sheibel *et al.*, J. Appl. Polym. Sci., 138 (2021) 50633.

## Nanopartículas de plata biogénicas antimicrobianas

María Belén Estevez\*<sup>a</sup>, Ricardo Faccio<sup>b</sup>, Silvana Alborés<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratorio de Microbiología, DEP BIO, Facultad de Química

<sup>b</sup> Centro NanoMat, Área Física, DETEMA, Facultad de Química

\* bestevez@fq.edu.uy

La nanotecnología ha permitido grandes avances en la lucha contra las infecciones causadas por bacterias y hongos. La síntesis biológica de nanopartículas resulta muy prometedora en cuanto a su potencial antimicrobiano.

La síntesis biológica es una tecnología verde utilizada para la producción de nanopartículas metálicas que se presenta como una buena alternativa frente a los métodos físicos y químicos convencionales que pueden utilizar reactivos tóxicos, costosos y condiciones drásticas de reacción. Por esta razón, los microorganismos tienen un inmenso potencial como herramienta ecológica y rentable para la síntesis biológica de nanopartículas. Se ha demostrado que las nanopartículas exhiben potencial antimicrobiano hacia diversos tipos de patógenos debido a su tamaño y capacidad de dañar las células a través de varios mecanismos, brindando una oportunidad interesante para limitar el crecimiento o destruir las células microbianas [1]. A pesar de que los mecanismos de acción antimicrobianos de las AgNPs no son totalmente conocidos y dependen de muchos factores incluyendo las propiedades de las nanopartículas y el tipo de microorganismo, algunos de los mecanismos que se proponen son la generación de especies reactivas del oxígeno y del nitrógeno ocasionando estrés oxidativo [2]

En este trabajo se realizó la síntesis extracelular de AgNPs a partir del hongo *Phanerochaete chrysosporium*. Las AgNPs fueron caracterizadas mediante UV-visible, Difracción de Rayos X a bajo Ángulo, TEM, DLS, Potencial Z, ICP-AES y Microscopía Raman Confocal. Se evaluó la actividad antimicrobiana determinando la concentración inhibitoria mínima frente a tres microorganismos de importancia en salud: *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus* y *Candida albicans*. Las AgNPs fueron capaces de inhibir el crecimiento tanto de las células bacterianas como las células fúngicas a muy bajas concentraciones. Para avanzar en el conocimiento de los posibles mecanismos de acción antimicrobianos y como complemento de estudios por Microscopía Raman Confocal de la interacción AgNPs con las células [3], se determinó la generación de especies reactivas del oxígeno y del nitrógeno para ambos microorganismos. Los resultados obtenidos sugieren que el estrés oxidativo generado por las nanopartículas biogénicas sería uno de los mecanismos de acción involucrados en la actividad antimicrobiana de amplio espectro observada. Estas propiedades de las nanopartículas biogénicas son de gran utilidad para el desarrollo de nanomateriales antimicrobianos de aplicación en diversas áreas, como la salud, la agricultura, la alimentación y la industria.

[1] Sanguineto, P., et al., *Nano Biomed Eng*, 2018, 10(2), 156-164

[2] Quinteros, M.A., et al, *Toxicology in vitro*, 2016, 36, 216-223

[3] Estevez, M.B., et al *Molecules*, 2020, 25, 2023

## Síntesis y propiedades antimicrobianas comparativas de nanopartículas bimetálicas (Fe-Ag) funcionalizadas con polímeros.

Guasamucare Rossannie\* <sup>a</sup>, Pereira Juan <sup>b</sup>, Alborés Silvana <sup>c</sup>, Arizaga Livia <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Cátedra de Química Inorgánica, Facultad de Química, Departamento Estrella Campos, Universidad de la República, Uruguay.

<sup>b</sup> Laboratorio de Petróleo, Hidrocarburos y Derivados, Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología, Departamento de Química, Universidad de Carabobo, Venezuela.

<sup>c</sup> Área de Microbiología. Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

\* rossannieg@gmail.com

La fabricación, síntesis y preparación de nanopartículas bimetálicas (compuestas por dos elementos metálicos diferentes) son una clase de materiales nanoestructurados que han recibido atención debido a sus interesantes propiedades y amplia gama de aplicaciones en catálisis, biología, química de materiales, sensores, farmacia, cosmética, entre otro [1]. La posibilidad de entender cómo combinar distintos elementos metálicos, en diferentes proporciones, a nivel nanométrico y de forma controlada, constituye un nuevo desafío en la ingeniería de nanomateriales [2]. Se sintetizaron nanopartículas de hierro y plata (Fe-Ag NPs), mediante la técnica de micela inversa, las cuales posteriormente fueron modificadas superficialmente a través del método de intercambio de ligando de un paso. Para ello, se construyó el sistema pseudoternario empleando Cloruro de cetiltrimetilamonio, CTAB como surfactante catiónico, nonilfenoletoxilado, como surfactante no iónico, n-butanol como co surfactante, n-hexano como fase orgánica y agua, con objeto de determinar la ruta de síntesis de las nanopartículas bimetálicas (BMNPs). Se consideró la mezcla de, CTAB + nonilfenoletoxilado + n-butanol como el tensioactivo [3]. La reacción de síntesis se llevó a cabo mediante la mezcla de cuatro microemulsiones idénticas, dos conteniendo como fase dispersa nitrato de plata ( $\text{AgNO}_3$ ) y tricloruro de hierro hexahidratado ( $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), respectivamente; y el resto, conteniendo borohidruro de sodio ( $\text{NaBH}_4$ ) como agente reductor a diferente concentración molar (1M y 0,02M, respectivamente). Una vez obtenidas las Fe-Ag NPs, se realizó la modificación superficial con polivinilpirrolina (PVP) y polietilenglicol (PEG) [4]. Las BMNPs funcionalizadas se caracterizaron por espectroscopia UV-Visible, microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopia infrarroja transformada de Fourier (FTIR), dispersión de luz dinámica (DLS) y potencial zeta. El tamaño promedio de Ag NPs estaba en el rango de 20-35 nm, mientras que las Fe-Ag NPs funcionalizadas presentan un tamaño promedio de 70-110 nm. Se examinó la actividad antibacteriana contra *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* y *Pseudomonas aeruginosa* encontrando que, las dos nanopartículas bimetálicas de Fe-Ag exhibieron fuertes actividades antibacterianas, especialmente las Fe-Ag-PEG NPs presentaron CIM menores, que las cubiertas con PVP. En líneas generales, los resultados obtenidos en los ensayos de actividad antimicrobiana in vitro fueron muy promisorios, demostrando el gran potencial antimicrobiano de las BMNPs frente a bacterias (Gram positivas y Gram negativas), abriendo la posibilidad a su uso potencial como agente antibacteriano en futuras aplicaciones biomédicas, cosméticas y farmacéuticas.

[1] Guasamucare R, Arizaga L, Pereira J. Rev Cienc e Ing. 2020;41(1):25–34.

[2] Chen H, Hu H, Tao C, Clauson RM, Moncion I, Luan X. ACS Appl Mater Interfaces. 2019;11(27):23858–69.

[3] Salvador, M.; Gutiérrez, G.; Noriega, S.; Moyano, A.; Blanco-López, M.C.; Matos, M. Int. J. Mol. Sci. 2021,22, 427.

[4] Delfi M, Ghomi M, Zarrabi A, Mohammadinejad R, Taraghdari ZB, Ashrafizadeh M. Prosthesis. 2020;2(2):117–39.

## Polimerización enzimática para la producción de PLA utilizando microorganismos antárticos

Alberto J. Liguori<sup>a</sup>, Mairan D. Guigou<sup>a</sup>, Maximiliano Colobbio<sup>b</sup>, Juan C. Ramos<sup>b</sup>, Magela Teliz<sup>a</sup>,  
María E. Vila<sup>a</sup>, Manuel Minteguiaga<sup>c</sup>, Laura Camesasca<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidad de la República, Facultad de Ingeniería, Departamento de Bioingeniería. Julio Herrera y Reissig 565, CP: 11300 Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> Laboratorio de Química Fina del Instituto Polo Tecnológico de Pando (IPTP), Bypass de Pando s/n, 15600 Pando, Canelones, Uruguay.

<sup>c</sup> Universidad de la República, Centro Universitario Tacuarembó, Ruta 5, km. 386500. Campus Interinstitucional de Aprendizaje, Investigación e Innovación 45000, Tacuarembó, Uruguay.

\*E-mail: aliguori@fing.edu.uy

Los residuos plásticos generados mundialmente son una de las grandes problemáticas medioambientales de los últimos tiempos, afectando principalmente los océanos [1]. La reducción de este tipo de residuos es lo que motiva la investigación en polímeros biodegradables. En los últimos tiempos la producción de ácido poliláctico (PLA) se realiza mediante catalizadores metálicos que generan residuos difícilmente manejables. Actualmente se han llevado a cabo una gran variedad de investigaciones con catalizadores biológicos dando resultados satisfactorios y ambientalmente amigables, especialmente en el área biomédica, donde este poliéster tiene potencial para placas óseas absorbibles, piel artificial, entre otras aplicaciones. Los métodos industriales utilizados para la síntesis de PLA pueden ser: condensación directa del ácido libre o mediante polimerización por apertura de anillo del láctido [2]. En este trabajo se planteó utilizar para la polimerización del PLA una lipasa proveniente de un microorganismo antártico perteneciente al género *Psychrobacter sp.* La producción de la enzima se realizó en dos biorreactores de laboratorio de 1 L a 20°C, pH 7, agitación 300 rpm. Se evaluó la actividad enzimática y crecimiento microbiano durante 96 h. La actividad enzimática se midió por absorbancia utilizando p-nitrofenil palmitato (pNPP) como sustrato y el crecimiento se cuantificó por densidad óptica a 600 nm y peso seco. La enzima se extrajo del medio mediante precipitación salina con sulfato de amonio. Las proteínas se cuantificaron utilizando la metodología de Bradford. Para la producción del PLA se estudió el método de polimerización directa (PD) a partir del ácido láctico y polimerización por ruptura de anillo (ROP) de la láctida. En la polimerización se agregó el monómero, tolueno seco y la enzima en botellas de 80 mL bajo una atmósfera de nitrógeno. En el caso de la PD se utilizó como monómero L-ácido láctico y en la ROP la D-láctida. Las soluciones se llevaron a un agitador orbital a 150 rpm durante 7 días, a 20°C para la PD y a 40°C para la ROP. Finalizadas las polimerizaciones se evaporó el exceso de solvente y se disolvieron los PLA obtenidos en una solución 50% etanol, 50% éter. El porcentaje de polimerización se determinó mediante la titulación de la solución, utilizando hidróxido de potasio 1 N, consiguiendo un grado de polimerización del 30% para PD y 65% para ROP. La polimerización por ruptura de anillo resultó la más prometedora para la obtención del bioplástico.

[1] E. van Sebille, C. Wilcox, L. Lebreton, N. Maximenko, B. Hardesty, J. van Franeker, M. Eriksen, D. Siegel, F. Galgani, K. Law, A global inventory of small floating plastic debris. *Environmental Research Letters* 10 (2015) 124006

[2] V.L. Lassalle, M.L. Ferreira, Lipase-catalyzed synthesis of polylactic acid: an overview of the experimental aspects. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental & Clean Technology*, 83(11) (2008) 1493-1502.

## Desarrollo de un adhesivo experimental bioactivo para uso odontológico.

Matias Mederos <sup>a\*</sup>, Belén Estevez <sup>b</sup>, Analía Castro <sup>c</sup>, Pablo Miranda <sup>c</sup>, Helena Pardo <sup>c,d</sup>, Silvana Alborés <sup>b</sup>, Guillermo Grazioli <sup>a</sup>.

<sup>a</sup>*Cátedra de Materiales Dentales, Facultad de Odontología, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

<sup>b</sup>*Área de Microbiología, DEPPIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

<sup>c</sup>*Laboratorio Nanomateriales, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay.*

<sup>d</sup>*Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

\*matiasmederos@odon.edu.uy

En los últimos años la aplicación de nanopartículas para el control de microorganismos se ha expandido considerablemente en el área de la salud humana y de materiales, proporcionando nuevos enfoques para prevenir, erradicar y combatir las infecciones relacionadas con biofilms [1]. Diversos tipos de nanopartículas en particular, las nanopartículas de plata, han demostrado eficacia para el tratamiento de estomatitis dentales asociados a la formación de biofilms por las levaduras *Candida albicans* y *Candida glabrata*, y biofilms de bacterias gram negativas [2], así como su capacidad de penetrar en los biofilms microbianos, exhibiendo una potente actividad antimicrobiana y buena biocompatibilidad [3]. La incorporación de estas nanopartículas en materiales odontológicos representa un área en pleno desarrollo, la cual aún no fue investigada en nuestro país [4]. El presente trabajo representa el primer intento de síntesis de un biomaterial odontológico en nuestro medio. Se evaluó el adhesivo resinoso determinando resistencia cohesiva, fuerza de unión a la estructura dental, etc. Además, se sintetizaron y caracterizaron nanopartículas de plata biogénicas que presentaron baja polidispersidad de tamaño y alta estabilidad coloidal. Asimismo, se evaluó la actividad antibiofilm de dichas nanopartículas en ensayos *in vitro* frente a bacterias Gram-positivas + y Gram-negativas, así como a levaduras (*Candida albicans*). Las nanopartículas biogénicas mostraron su capacidad de erradicar o inhibir los biofilms microbianos. Estos resultados preliminares permiten plantear la continuación de esta línea de investigación interdisciplinaria evaluando el efecto del agregado de estas nanopartículas a sistemas adhesivos experimentales, la distribución e interacción de dichas partículas con el adhesivo resinoso, su influencia en diferentes concentraciones y el análisis de sus propiedades antimicrobianas y otras propiedades de interés en el área odontológica.

[1] Bhargava, S.S.A. Biofilms and human health. *Biotechnology Letters* 2015, 38, 1–22.

[2] Radzig, M.A.; Nadtochenko, V.A.; Koksharova, O.A.; Kiwi, J.; Lipasova, V.A.; Khmel, I.A. Antibacterial effects of silver nanoparticles on gram-negative bacteria: Influence on the growth and biofilms formation, mechanisms of action. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 2013, 102, 300-306.

[3] Halkai, K.R.; Mudda, J.A.; Shivanna, V.; Rathod, V.; Halkai, R. Antibacterial Efficacy of Biosynthesized Silver Nanoparticles against *Enterococcus faecalis* Biofilm: An *in vitro* Study. *Contemporary clinical dentistry* 2018, 9, 237-241.

[4] Schmoeckel J, Gorseta K, Splieth CH, Juric H. How to Intervene in the Caries Process: Early Childhood Caries - A Systematic Review. *Caries Res.* 2020;54(2):102-112.

[5] Mederos Gómez MM, Garcia IM, Leitune VCB, Collares FM. Surface and mechanical properties of adhesives with calcium phosphates challenged to different storage media. *Braz. J. Oral Sci.* 2020 Nov. 3;19:e200181.



## Characterization of materials based on hyaluronic acid and calcium phosphate, synthesized by the microwave hydrothermal method, used as collagen biostimulators for facial rejuvenation

Amantéa, D.V.<sup>a</sup>; Guedes, A.P.P.<sup>a</sup>; Carreira, A.J.<sup>a</sup>; Italiano, A.E.V.<sup>b</sup>; Tranquilin, R.L.<sup>\*c</sup>;  
Santos, L.M.<sup>c</sup>

<sup>a</sup> PhD in the Strictu Sensu Postgraduate Program in Biotechnology and Innovation in Health- Anhanguera University of São Paulo

<sup>b</sup> PHD student at the Department of Dental Materials and Prosthesis at the School of Dentistry of Araraquara at Universidade Estadual Paulista

<sup>c</sup> Professors of the Strictu Sensu Postgraduate Program in Biotechnology and Innovation in Health- Anhanguera University of São Paulo

\*ricardotranquilin@gmail.com

The increased interest in facial rejuvenation treatments has led to a growing willingness to develop biomaterials whose mechanism promotes the biostimulation of collagen in the dermis [2], [3]. An alternative is the composite formed by hyaluronic acid and calcium phosphate derivatives, a material that adds the ability to induce fibroblasts, which is a characteristic of the hyaluronic acid, with bioactivity and a lower rate of reabsorption in body fluids, characteristics of calcium phosphate derivatives [3], [4], [5]. The synthesis method used in the production of calcium phosphates can interfere with the physicochemical properties, therefore, the improvement of techniques for its production is of high importance [1]. The objective of the present work was to study the physicochemical characteristics of calcium phosphate derivatives produced by the microwave hydrothermal method, associated or not to thermal treatment, in addition to analyzing the viability of their inclusion in hyaluronic acid. Samples of calcium phosphate derivatives were produced using the microwave hydrothermal method at a synthesis temperature of 60°C, which were subsequently sent to heat treatment at 300°, 500° or 700°C. Physical-chemical analyzes (DRX, FTIR, SEM) allowed the presence of different phases of calcium phosphate derivatives to be verified in all samples, however, a crystalline character became more evident at higher calcination temperatures. In the second step, a solution of calcium phosphate with hyaluronic acid, at a concentration of 16mg.g<sup>-1</sup>, was taken to the microwave hydrothermal system at a temperature of 60° C. Physical-chemical characterizations (FTIR, SEM) showed that calcium phosphate derivatives were incorporated into hyaluronic acid. The results allowed concluding that the microwave hydrothermal method presented satisfactory results for obtaining a composite of calcium phosphates and hyaluronic acid, being a promising alternative for the development of biomaterials that promote collagen biostimulation for facial rejuvenation.

**Keywords:** bioceramics; composites, polymers, hydrothermal synthesis, rejuvenation

[1] BHAT, S.; UTHAPPA, U.T.; ALTALHI, T.; JUNG, H.Y., KURKURI, M.D. Functionalized Porous Hydroxyapatite Scaffolds for Tissue Engineering Applications: A Focused Review. **ACS Biomater Sci Eng**, v. 8, n. 10 (2022) 4039-4076.

[2] CHANG, J.W.; KOO, W.Y.; KIM, E.K.; LEE, S. W.; LEE, J.H. Facial Rejuvenation Using a Mixture of Calcium Hydroxylapatite Filler and Hyaluronic Acid Filler. **J Craniofac Surg**, v. 31, n. 1 (2020) 18-21.

[3] CUI, Y.; WANG, F.; VOORHEES, J.J.; FISHER, G.J. Rejuvenation of Aged Human Skin by Injection of Cross-linked Hyaluronic Acid. **Plast Reconstr Surg**, v. 147 (2021) 43S- 49S.

[4] GONZÁLEZ, N.; GOLDBERG, D.J. Evaluating the Effects of Injected Calcium Hydroxylapatite on Changes in Human Skin Elastin and Proteoglycan Formation. **Dermatologic Surgery**, v. 45 (2019) 547–551.

[5] VARADAVENKATESAN, T.; VINAYAGAM, R.; PAI, S.; KATHIRVEL, B.; PUGAZHENDHI, A.; SELVARAJ, R. Synthesis, biological and environmental applications of hydroxyapatite and its composites with organic and inorganic coatings. **Prog. Org. Coat.** (2021)

## Radisensibilizadores como herramienta para mejorar la radioterapia

Isabel Galain<sup>1,2</sup>, V. Zucolotto<sup>2</sup>, María Pérez Barthaburu<sup>3</sup>, Ivana Aguiar<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Área Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, General Flores 2124,  
Montevideo, Uruguay,

<sup>2</sup>Grupo de Nanomedicina e Nanotoxicología, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo,

<sup>3</sup>Departamento de Desarrollo Tecnológico, Centro Universitario Regional del Este, Universidad de la  
República, Rocha, Uruguay

Corresponding author e-mail: iaguiar@fq.edu.uy

El cáncer es una de las principales amenazas para la salud humana, debido a la gran cantidad de casos y las altas tasas de mortalidad, que se espera aumenten en los próximos años. Aunque la radioterapia es el principal tratamiento, una de las desventajas es que no es específica para las células tumorales, afectando también a las células sanas. Los radiosensibilizadores proporcionan una solución novedosa y sencilla a este problema, ya que aumentan la cantidad de radiación que una célula puede absorber. Esto permite tratamientos contra el cáncer que utilicen una dosis más baja de radiación, lo que genera menos efectos secundarios para el paciente. Sintetizamos nanopartículas de sulfuro de bismuto ( $\text{Bi}_2\text{S}_3$ ) utilizando el método de "hot intention" seguido de un cambio de ligandos, para su uso como radiosensibilizador. Sintetizamos nanorods de  $\text{Bi}_2\text{S}_3$  que miden en promedio  $4,1 \pm 1,2$  nm de ancho y  $20,2 \pm 7,0$  nm de largo. Estas nanopartículas se recubrieron con éxito con polivinilpirrolidona (PVP) para mejorar su biocompatibilidad. Se logró con éxito el cambio de ligando por PVP. Estudiamos la citotoxicidad de las nanopartículas en células de cáncer de mama humano (MCF7), incubándolas durante 72 horas. Las nanopartículas recubiertas no evidenciaron citotoxicidad hasta 2500 g/mL. Además, realizamos pruebas de radiosensibilidad utilizando una fuente de Co-60 de 2 Gy. Las células MCF7 que se incubaron con nanopartículas y se irradiaron mostraron un aumento del 38 % en la muerte celular en comparación con las células que solo se irradiaron, sin nanopartículas. También muestran un aumento de la muerte celular por necrosis. Nuestros resultados confirman que las nanopartículas de  $\text{Bi}_2\text{S}_3$  recubiertas con PVP no son citotóxicas en un amplio rango de concentraciones. Cuando se combinan con la radiación gamma, las nanopartículas aumentan con éxito la eficacia de la radioterapia y ofrecen la posibilidad de utilizar dosis de radiación más bajas en los tratamientos contra el cáncer.

## Mechanical characterization of the Ti-40Nb (wt.%) from the room until cryogenic temperatures

Ariel Moreno-Gobbi<sup>\*,a</sup>, Paulo Sergio Silva Jr.<sup>b</sup>, Rafael Formenton Macedo dos Santos<sup>c</sup>, Conrado Ramos Moreira Afonso<sup>c</sup>, Diego Rafael Nespeque Correa<sup>d</sup>, Carlos Roberto Grandini<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Laboratorio de Acústica Ultrasonora, Instituto de Física, Facultad de Ciencias, Udelar, Iguá 4225, Montevideo, Uruguay

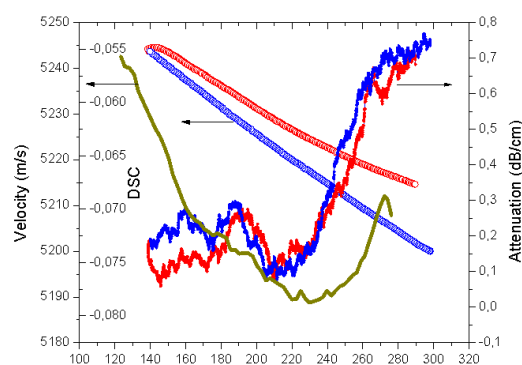
<sup>b</sup>Department of Physics, Federal University of São Carlos (UFSCar), 13565-905, São Carlos, SP, Brazil

<sup>c</sup>Department of Materials Engineering (DEMa), Federal University of São Carlos (UFSCar), 13565-905, São Carlos, SP, Brazil

<sup>d</sup>Laboratory of Anelasticity and Biomaterials, School of Sciences, UNESP – Univ. Estadual Paulista, 17033-360, Bauru, SP, Brazil

\*moreno@fisica.edu.uy

The  $\beta$ -type titanium alloys ( $\beta$ -Ti) are highlighted because, among other properties, they show excellent corrosion resistance, high strength-to-density ratio, good biocompatibility, and adequate biomechanical compatibility.  $\beta$ -Ti alloys are susceptible to phase transformation through deformation or heat treatment, which impacts their mechanical properties. Therefore, from cryogenic to high temperatures, it is necessary to understand how the phase transformation mechanisms occur in  $\beta$ -Ti alloys to optimize their properties according to the desired applications, for instance, biomedical, chemistry, and aerospace industries. This study focused on the mechanical characterization of the Ti-40Nb (wt.%) from the room until cryogenic temperatures. Ultrasound measurements measured the sound velocity, and attenuation at 10 MHz with longitudinal waves until 150 K. The results were correlated with differential scanning calorimetry (DSC), X-ray diffraction (XRD), scanning and transmission electron microscopy (SEM and TEM), and Vickers microhardness measurements. Figure 1 depicts some unconventional peaks on the sound attenuation curves, centered at 180 K and 160 K, related to phase transitions induced by mechanical stress. The results shed new light on the phase transformations of novel  $\beta$ -Ti alloy, which could be helpful in high-performance applications.



**Figure 1:** Donward DSC measurement (green curve) and untrasoasurements at 10 MHz with X-cut transducers (blue – cooling and red – heating the sample).

[1] R.P. Kolli, A. Devaraj, *Metals*, 8:7 (2018) 506-547.

[2] A. Moreno-Gobbi, P.S. Silva Jr., D.R.N. Correa, A.M. Milá, J.A.M. Chaves, C.R. Grandini, R.F.M. dos Santos, C.R.M. Afonso, *Journal of Materials Research and Tecnology*, 18 (2022) 4990-5004.

## Capacidad de absorción de agua de un polímero extracelular producido por la bacteria antártica *Janthinobacterium* sp. UV13

Claudia Rodríguez García\* <sup>a</sup>, Juan Marizcurrena <sup>b</sup>, Carolina Fontana <sup>c</sup>, Eloisa Arrarte <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Físicoquímica, Facultad de Química, Udelar, Gral. Flores 2124, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> Sección Bioquímica y Biología Molecular, Facultad de Ciencias, Udelar, Iguá 4225, Montevideo, Uruguay.

<sup>c</sup> Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Udelar, Ruta 3 km 363, Paysandú, Uruguay.

\* cclaudiarg@fq.edu.uy

Los polímeros superabsorbentes (SAP) se definen como aquellos polímeros hidrofílicos capaces de absorber y retener grandes cantidades de agua, entre los reportados encontramos que absorben de 100 a 1000 veces su peso en agua [1][2]. Estos polímeros se emplean en productos como pañales y toallas sanitarias, en curación de heridas, como portadores de nutrientes y como depósitos de agua en el suelo, entre otros. Los SAP más utilizados son producidos a partir de derivados del petróleo como el ácido poliacrílico, la poliacrilamida y el poliacrilonitrilo [1]. Estos SAP poseen un alto peso molecular y una estructura completamente reticulada que hace que tengan una baja biodegradabilidad y, por lo tanto, un gran impacto negativo en el medioambiente. Debido a esto, está cobrando interés el empleo de polímeros de origen natural. Las bacterias pueden sintetizar una amplia gama de biopolímeros, como polisacáridos, poliamidas, poliésteres y polifosfatos. En la búsqueda de microorganismos capaces de producir nuevos biopolímeros, resulta interesante la bioprospección de nichos biológicos extremos. La Antártida es un entorno ideal, ya que ha llevado a las bacterias a desarrollar diferentes estrategias de adaptación, entre ellas la producción de exopolímeros (EPS). Entre los aislamientos bacterianos antárticos obtenidos por nuestro grupo en la Isla Rey Jorge (Antártida) se encuentra la bacteria *Janthinobacterium* sp. UV13. Esta bacteria es resistente a UV y produce, entre otros metabolitos, un pigmento conocido como violaceína y un polímero extracelular (EPS). Este EPS ha mostrado características interesantes como la capacidad de retener grandes cantidades de agua. En el presente estudio se cultivó *Janthinobacterium* sp. UV13 en matraces con medio TSB (Tryptone Soy Broth) complementado con glucosa como fuente de carbono adicional. El EPS producido se precipitó con acetona (relación acetona:medio de cultivo, 3:1) a 4 °C durante 24 h. En estas condiciones se obtuvo un rendimiento del EPS de 3 g L<sup>-1</sup>. La absorción de agua del EPS se evaluó en una primera instancia a 25 °C en agua mili Q (mQ<sup>®</sup>), suero fisiológico (0,9 % en NaCl) y soluciones diluidas de NaOH y HCl variando a su vez el pH (4, 7 y 9) en las dos últimas. Los mejores resultados de absorción fueron para la solución diluida de NaOH a pH7, aumentando aproximadamente 500 veces su peso en agua, mientras que en suero al mismo pH aumenta unas 100 veces. Del análisis de varianza, se concluye que el NaCl afecta la absorción y estabilidad del EPS. También se observó que, para cualquiera de los casos, la absorción más baja fue a pH 4 y que el pH 9 favorece la descomposición del EPS. Se continuó con el efecto de la temperatura estudiando la absorción a 25, 30 y 37 °C para soluciones diluidas de NaOH y HCl a mismos pH y agua mQ<sup>®</sup>. La tendencia de absorción se mantiene, dando los mejores resultados a pH 7, siguiendo con resultados estadísticamente similares para el agua mQ<sup>®</sup> y pH 9 y teniendo los resultados más bajos para el pH 4. Sin embargo, la absorción disminuye con el aumento de la temperatura y esta además acelera la descomposición del EPS. El pH 7 ajustado con NaOH a 25°C en ausencia de cualquier sal dio resultados que resultan prometedores, ya que algunos de los mejores materiales SAP sintéticos absorben unas 1000 veces su peso en agua.

[1] C.J. Wu, J. Raffa, P. Picchioni et al. Progress in Polymer Science, 125 (2022) 101475.

[2] F. Zhan, M. Liu, M. Guo, L. Wu. Journal of Applied Polymer Science, 92(2004) 3417-3421.

## Study of the microstructural properties of calcium phosphates processed by microwave-assisted hydrothermal at different temperatures and evaluation of the influence of sintering using temperatures of interest.

Fernando Godoy de Oliveira <sup>a</sup>, Marcio Luiz dos Santos <sup>a</sup>, Mauricio Roberto Bomio Delmonte <sup>b</sup>, Elson Longo <sup>c</sup>, Ricardo Luis Tranquilin <sup>a c \*</sup>

<sup>a</sup> *Postgraduate Program in Biotechnology and Innovation in Health – University Anhanguera São Paulo (UNIAN), 05145-200 São Paulo, SP, Brazil*

<sup>b</sup> *LSQM – Laboratory of Chemical Synthesis of Materials – Department of Materials Engineering, Federal University of Rio Grande do Norte – UFRN, P.O. Box 1524, Natal, RN, Brazil*

<sup>c</sup> *CDMF-LIEC, Federal University of São Carlos, Department of Chemistry, P.O Box 676, São Carlos, SP 13565-905, Brazil*

\* ricardotranquilin@gmail.com

Advances in medicine, together with the principles of engineering and life sciences, lead to the development of synthetic materials, which effectively enable the conservation, repair, regeneration and functional replacement of organs or tissues in the human body.[1]

The science of biomaterials is “the study of the structure and properties of biomaterials; the mechanisms by which they interact with biological systems and their performance in clinical use”. Biomaterial is defined as “material intended to interact with biological systems to assess, treat, augment, or replace any tissue, organ, or function in the body”. [2]

One of the materials used in this area are tricalcium phosphates known for their biocompatibility and wide application in the medical and dental field. Due to the similarity with bone composition and its ability to strongly bind to human hard tissue, its synthesis (in the case of a bioceramic material) is of great interest for several clinical applications in the biomedical area.[3]

A very interesting approach, which is a rapidly growing research area, is the use of microwave irradiation as a heating method in different types of chemical reactions, either in open vessels or under hydro or solvothermal conditions. The field has a wide scope in relation to the synthesis of organic or inorganic compounds and tends to continue growing in the coming years, making it even possible to use such methods for non-laboratory scales.[4]

Therefore, in this work, we report the synthesis of calcium phosphate via a hydrothermal microwave assisted, at different temperatures and evaluate the influence of sintering using temperatures of interest. These powders were analyzed by X-ray diffraction (XRD), Fourier transform Raman (FT-Raman) spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy (FT-IR), scanning electronic microscopy (SEM).

[1] Barrere, F.; Mahmood, T. A.; Groot, K.; Blitterswijk, CAV. Advanced biomaterials for skeletal tissue regeneration: Instructive and smart functions. *Materials Science and Engineering*, v. 59, 2008.

[2] D.F. Williams, J. Black and P.J. Doherty, “Consensus report of second conference on definitions in biomaterials,” in *Biomaterial-Tissue Interfaces*, Vol. 10, eds. P.J. Doherty, R.L. Williams, D.F. Williams and A.J.C Lee, Elsevier, Amsterdam (1992).

[3] C. A. Zamperini *et al.* Antifungal Applications of Ag-Decorated Hydroxyapatite Nanoparticles. *Journal of Nanomaterials* Volume 2013, Article ID 174398.

[4] De Sousa Filho e Serra.; *Metodologias de Síntese em fase líquida de nanomateriais inorgânicos à base de terras raras*. *Quim. Nova*, Vol. 38, No. 5, 2015.

## Cytotoxicity of bismuth nanoparticles coated with dextran and polyvinylpyrrolidone in U87 glioblastoma cells

Matheus H. L. Lima<sup>\*ab</sup>, Fernando M. Diz<sup>c</sup>, Rafael D. Weimer<sup>ab</sup>, Cristhiane A. Valente<sup>ab</sup>, Elisa M. N. Oliveira<sup>bd</sup>, Matheus R. Caloni<sup>b</sup>, Danieli B. Guerra<sup>e</sup>, Ricardo M. Papaléo<sup>ab</sup>

<sup>a</sup>Programa de Pós-graduação em Engenharia e Tecnologia dos Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul

<sup>b</sup>Centro Interdisciplinar de Nanociências e Micro-Nanotecnologia, Escola Politécnica, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul

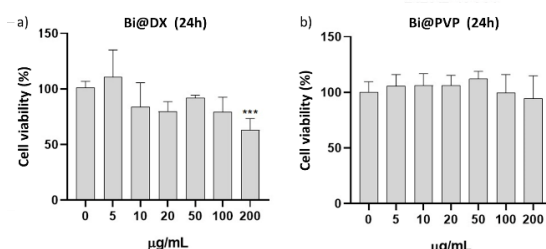
<sup>c</sup>Instituto do Cérebro, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul

<sup>d</sup>Laboratório de Novos Materiais Orgânicos e Química Forense, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

<sup>e</sup>Department of Cancer Research Center Groningen, University Medical Center Groningen

\* Matheus.Lima94@edu.pucrs.br

Glioblastoma multiforme (GBM) is one of the most aggressive type of brain tumor, and standard treatment strategies has shown limited success.[1] Thus, new approaches have been considered to improve the treatment effectiveness, including the use of metallic nanoparticles.[1] The engineering of the NP characteristics, such as size, morphology and surface coating is crucial for biomedical applications because it allows to improve the stability, biocompatibility, and the overall interaction with biological tissue.[2] In this work, we report on the cytotoxicity of BiNPs coated with dextran (Bi@DX) and polyvinylpyrrolidone (Bi@PVP), aimed to be used as radiosensitizers in radiotherapy. Bi@DX and Bi@PVP NPs were synthesized from protocol adapted from Brown (2012)[3] and the cytotoxicity was performed using the MTT assay. For that, U87MG glioblastoma cells were exposed to different concentrations of NPs (5, 10, 20, 50, 100 and 200  $\mu\text{g}/\text{mL}$ ) and the cell viability was evaluated after 24h of incubation. TEM images reveals the diameter of Bi spherical cores of  $4.4 \pm 1.2$  nm for Bi@DX and  $22.5 \pm 5.9$  nm for Bi@PVP. The zeta potential values were  $-5.9 \pm 0.5$  mV and  $+0.003 \pm 0.5$  mV for the Bi@DX and Bi@PVP NPs, respectively. Significant changes on cell viability were observed only at an exposure concentration of 200  $\mu\text{g}/\text{mL}$ , for Bi@DX. The Bi@PVP NPs did not alter the viability of tumor cells at all exposure levels tested. Our results emphasize the significance of surface coating in determining the biological effect of BiNPs and underscore the potential of PVP coating in the creation of a promising tool for the treatment of GBM. The next application steps will include the analysis of reactive oxygen species production caused by irradiation with X-rays from a 6 MV linear accelerator.



[1] Ruiz-Garcia H, Ramirez-Loera C, Malouff TD, Seneviratne DS, Palmer JD, Trifiletti DM. Int. J. Mol. Sci. 22 (18), (2021), 9673

[2] Xiong P, Huang X, Ye N, Lu Q, Zhang G, Peng S, Wang H, Liu Y. Adv. Sci. 9, (2022), 2106049

[3] Brown AL, Goforth AM. Chem. Mater. 24, (2012), 1599

## **A04 – Agroforestal**

---

**A04 – P01 al P03 – Viernes**



## Obtención de pulpa soluble por post-tratamiento a partir de pulpa kraft blanqueada de eucaliptus

Viviana Palombo \*<sup>a</sup>, María N. Cabrera <sup>a</sup>, Leonardo Clavijo <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Grupo de Ingeniería de Procesos Forestales, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República. Montevideo, Uruguay.*

\* [vpalombo@fing.edu.uy](mailto:vpalombo@fing.edu.uy)

Mi trabajo de Doctorado en Ingeniería Química se enfoca en la obtención de pulpa soluble por post-tratamiento utilizando como material de partida pulpa kraft blanqueada de eucaliptos producida en Uruguay. Este trabajo se ve motivado por el gran desarrollo que ha tenido el mercado forestal-celulósico en el país, lo cual abre oportunidades de inclusión de productos de mayor valor agregado como la pulpa soluble, en este caso a partir de un commodity. Esto también permitiría que empresas de menor porte puedan incorporarse al sector, debido a la menor inversión que requeriría esta tecnología en comparación con la producción de pulpa soluble tradicional, la que se produce a partir de la madera incluyendo una etapa de prehidrólisis seguida por el pulpeo kraft o al sulfito. La pulpa soluble cuenta con múltiples aplicaciones, 65% de la misma es utilizada en de la industria textil para la producción de tejidos sintéticos de viscosa y modal. También es utilizada en la producción de micro y nano celulosa, con diversas aplicaciones en la industria alimentaria, farmacéutica y electrónica. La pulpa soluble se define como aquella pulpa con un contenido de celulosa mayor al 92% y un contenido de hemicelulosas menor al 8%, también requiere valores de grado de blanco mayores al 91% y viscosidad entre 400 y 550 mL/g. Se espera que los productos obtenidos a partir de pulpa soluble tengan propiedades físicas y químicas similares a los de la celulosa, debido al elevado contenido de ésta en la pulpa. La presencia de hemicelulosas en la pulpa soluble puede generar reacciones incompletas y no homogéneas, así como decoloración y menor resistencia, por lo que es necesario extraerlas de la pulpa de partida. La bibliografía existente sobre este método es escasa. Se proponen métodos de extracción con álcali en frío y en caliente, extracción con agua caliente, extracción con líquidos iónicos, extracción con solventes orgánicos y purificación con enzimas. Este trabajo abordará los métodos de extracción alcalina en frío (CCE) y extracción con agua caliente (HWT). El proceso CCE tiene como ventaja una buena remoción de hemicelulosas, mejora algunas propiedades de la pulpa soluble y tiene un bajo consumo energético, sin embargo, implica un elevado consumo de hidróxido de sodio. Por otro lado, el proceso HWT utiliza como único medio de extracción el agua, lo cual también facilita la recuperación de las hemicelulosas extraídas, pero es un proceso poco selectivo y que empeora el grado de blanco de la pulpa soluble. Además, se ensayará la incorporación de una etapa previa de tratamiento mecánico, esperando que la fibrilación externa generada facilite el proceso de extracción, aumentado el rendimiento y permita el uso de condiciones menos severas. Entre los desafíos a abordar se encuentran: la disminución de viscosidad por auto-hidrólisis, la disminución de reactividad de la pulpa producidas por mercerización en medio alcalino y la búsqueda de homogeneidad de distribución de peso molecular.

## Evaluación y modelado cinético de la pirólisis de cáscara de arroz por termogravimetría

Patrice Portugau\* <sup>a</sup>, Martin Torres <sup>a</sup>, Mauricio Rodriguez <sup>b, c</sup>

<sup>a</sup> Área Físicoquímica-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Gral. Flores 2124, 11800 Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> PDU Ciencias Físicas y sus aplicaciones, Centro Universitario Regional del Este, Universidad de la República, Ruta 15 y Ruta 9, Rocha, 27000, Uruguay.

<sup>c</sup>GDMEA, Área Radioquímica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Gral. Flores 2124, 11800 Montevideo, Uruguay.

\* portugau@fq.edu.uy

En el presente trabajo se ha investigado la cinética de la pirólisis de la cáscara de arroz empleando termogravimetría. A pesar de que varios trabajos han sido publicados en los cuales se emplean modelos cinéticos previamente definidos, estos modelos traen consigo algunas suposiciones, que al ser examinadas en profundidad pueden no cumplirse para su aplicación particular. Por medio de este trabajo se demuestra que es posible, al considerar la composición química del material, modelar su descomposición térmica. La biomasa estudiada fue cáscara de arroz de variedad *Tacuari*, cuyos componentes químicos principales son hemicelulosa (HC), celulosa (C), lignina (L) y cenizas (constituida principalmente por sílice) [1]. Esta fue sometida a un tratamiento con NaOH con la finalidad de remover la sílice de su matriz, dando lugar a dos muestras nombradas; cáscara de arroz (CA) y cáscara de arroz tratada (CAT). El estudio de la pirólisis se realizó por termogravimetría en atmósfera de nitrógeno, empleando un caudal de 50 cm<sup>3</sup>/min, y tasas de calentamiento de 10, 15, 20 y 25 K/min, desde temperatura ambiente hasta 1223 K. A partir de los resultados obtenidos, fue calculada la conversión ( $\alpha$ ) y su derivada respecto a la temperatura ( $d\alpha/dT$ ). Teniendo en cuenta que la descomposición térmica de la CA/CAT implica la descomposición en múltiples eventos solapados, se construyó un modelo cinético para  $\alpha$  y  $d\alpha/dT$ . El modelo contempla el solapamiento de tres etapas, donde cada una se describe por una función potencial de orden uno respecto a  $(1 - \alpha)$ . Asimismo, permite determinar tres parámetros cinéticos para cada etapa; proporción de la etapa sobre el total ( $c_i$ ), energía de activación de la etapa ( $E_{a_i}$ ) y factor pre-exponencial ( $A_i$ ). De acuerdo con las recomendaciones de la ICTAC el ajuste entre el modelo y los datos experimentales fue realizado teniendo en cuenta todas las tasas de calentamiento [2]. Los valores obtenidos son comparables a los obtenidos por métodos isoconversionales. Asimismo, los valores de  $E_{a_i}$  obtenidas para cada etapa se corresponden con las reportadas para HC, C y L. Asimismo, se pudo observar una relación entre los  $c_i$ ,  $c_2$  y  $c_3$  y la cantidad HC, C y L, presente en las biomásas, respectivamente.

[1] Zhang, S., Dong, Q., Zhang, L., & Xiong, Y. (2016). Effects of water washing and torrefaction on the pyrolysis behavior and kinetics of rice husk through TGA and Py-GC/MS. *Bioresource technology*, 199, 352-361.

[2] Vyazovkin, S., Burnham, A. K., Favergeon, L., Koga, N., Moukhina, E., Pérez-Maqueda, L. A., & Sbirrazzuoli, N. (2020). ICTAC Kinetics Committee recommendations for analysis of multi-step kinetics. *Thermochimica Acta*, 689, 178597.

## Desarrollo y caracterización de nanohíbridos quitosano-nanopartículas de plata biogénicas con potencial aplicación en agroalimentos

Noheilly Vasquez <sup>a,b</sup>, Valeria Elizalde <sup>a</sup>, Analía Castro <sup>b</sup>, Iris Miraballes <sup>c</sup>, Helena Pardo <sup>b,d</sup>, Silvana Alborés <sup>a</sup>

<sup>a</sup>.Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, DEPPIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup>.Laboratorio Nanomateriales, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay.

<sup>c</sup>.Laboratorio de Biotecnología, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay.

<sup>d</sup>.Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

\* noheilly@gmail.com

En el área agrícola-alimentaria las pérdidas de productos relacionadas con enfermedades causadas por microorganismos son considerables. Esto obliga a tomar medidas de combate que aumentan los costos de producción, afectan la calidad y la durabilidad de los productos y constituyen una de las principales causas de inestabilidad en la empresa agrícola y del déficit alimentario mundial [1]. La nanotecnología en la agricultura ha mostrado un gran potencial en el desarrollo de importantes y nuevos materiales y sistemas. Las nanopartículas basadas en quitosano son utilizadas para diversas aplicaciones por su biodegradabilidad, alta permeabilidad a las membranas biológicas, no ser tóxicas para los seres humanos, y su potencial antimicrobiano. En particular en el área agrícola es de gran interés su amplia actividad antimicrobiana y su capacidad de inducir mecanismos de resistencia en plantas frente a fitopatógeno. Asimismo, la aplicación de las nanopartículas de plata (AgNPs) se ha expandido en el área de la salud humana y animal, agrícola y de materiales, demostrando su potencial utilidad en la prevención de infecciones microbianas. Además, se ha demostrado que el agente estabilizante presente en las AgNPs de síntesis biológica les confiere mayor actividad antimicrobiana, menor citotoxicidad y genotoxicidad. Algunas AgNPs sintetizadas por hongos, como las previamente sintetizadas por nuestro grupo, presentaron amplia actividad antimicrobiana contra bacterias y hongos patógenos de plantas [2]. Por lo que, combinar ambos sistemas de nanopartículas (quitosano y Ag) es una interesante alternativa, para que sus propiedades contribuyan de forma sinérgica en nuevos nanomateriales híbridos. En este trabajo se realizó la síntesis y caracterización de nanohíbridos a base de quitosano (CS) y nanopartículas de plata biogénicas. Para ello se sintetizaron nanopartículas de plata biogénicas utilizando el hongo *Phanerochaete chrysosporum* [2]. Posteriormente, las síntesis de los nanohíbridos, consistió en preparar las soluciones de quitosano a diferentes concentraciones (1.2, 2.4 y 4.8 mg/mL) y dejarlas en agitación continua por 24 horas. Al concluir el tiempo, se añadieron gota a gota las nanopartículas de plata biogénicas (0,4 nM) a las soluciones de quitosano y se dejó en agitación por 5 horas. Los productos de las síntesis se centrifugaron, lavaron, resuspendieron en agua desionizada, para luego ser caracterizadas por espectroscopía UV-visible, Dynamic Light Scattering (DLS) y Potencial Z. A mayor concentración de quitosano se observó una disminución en la banda RPS de las AgNPs así como un incremento en el tamaño determinado por DLS, como se esperaba por la unión del quitosano a la AgNP. En concordancia con estos resultados, el potencial Z negativo de las AgNPs cambió a valores de entre +26 y +30, confirmando la unión de quitosano en la formación del nanohíbrido.

Agradecimientos: Proyecto ANII FMV\_1\_2021\_1\_167206, Beca ANII, Posgrado Biotecnología, UDELAR

[1] H. M. C. de Azeredo. Trends in Food Science and Technology., 30 (2013) 56 -69.

[2] P. S. Sanguineto, R. M. Fratila, M.B. Estevez, J.M. de la Fuente, V. Grazú, S. Alborés. Nano Biomed. Eng. 10 (2018). 165–73.

## **A05 – Catalisis**

---

**A05 – P01 al P09 – Jueves**

**A05 – P10 al P14 – Viernes**

## Influencia del método de preparación de catalizadores de Ni y La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sobre SiO<sub>2</sub> para la producción de H<sub>2</sub> por reformado de acetona con vapor de agua

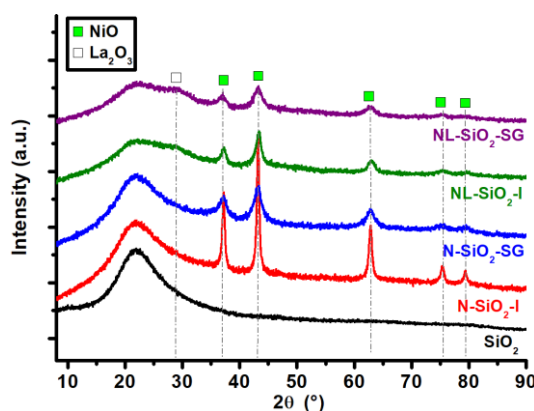
Antonella Cassetta\* <sup>a</sup>, Martín Torres <sup>a</sup>, Mauricio Musso <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Gral. Flores 2124, Montevideo 11800, Uruguay

\* E-mail: antocassetta@gmail.com

Si bien en la actualidad los combustibles fósiles representan un 80% del consumo energético mundial, el incremento en la concentración de CO<sub>2</sub> en la atmósfera del planeta debido a su combustión directa ha llevado a efectos nocivos sobre el medio ambiente, principalmente en la forma del calentamiento global. Es en este sentido, que el pasaje a nuevas fuentes de energía limpias y renovables es crítico para nuestro futuro. El hidrógeno (H<sub>2</sub>) aparece como una solución atractiva para sustituir, por lo menos parcialmente, a los combustibles fósiles. Particularmente, el reformado con vapor de agua de derivados líquidos de la biomasa aparece como una opción interesante. El reformado de acetona (CH<sub>3</sub>COCH<sub>3</sub> + 5H<sub>2</sub>O → 8H<sub>2</sub> + 3CO<sub>2</sub>) se ha estudiado, principalmente por ser ésta un elemento representativo de los compuestos carbonílicos frecuentemente encontrados en el bio-oil [1]. Para este tipo de proceso, los catalizadores de Ni soportados sobre distintos óxidos son los más utilizados. Dentro de los soportes, la sílice (SiO<sub>2</sub>) aparece como una opción interesante debido a su resistencia a la abrasión, abundancia y baja toxicidad. Asimismo, mediante un tratamiento adecuado, es posible aumentar su área específica y porosidad [2], logrando obtener un soporte atractivo para su aplicación en catalizadores soportados.

Este trabajo tiene como objetivo evaluar la influencia del método de preparación de catalizadores de Ni soportados sobre SiO<sub>2</sub> mesoporosa en la reacción de reformado de acetona con vapor de agua. También se evaluó como afecta el agregado de La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ya que este último óxido favorece la dispersión de la fase activa, así como la adsorción del agente oxidante (H<sub>2</sub>O) y del CO<sub>2</sub>, permitiendo su reacción con distintos intermediarios de reacción, entre ellos los residuos carbonosos. Catalizadores de Ni sobre SiO<sub>2</sub> (N-SiO<sub>2</sub>, 15 % Ni en peso) y Ni sobre La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> (NL-SiO<sub>2</sub>, 15 % Ni y 15 % La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, en peso) fueron preparados mediante impregnación ("I") o utilizando una técnica sol-gel ("SG") y finalmente calcinados a 600 °C. La Figura muestra el espectro de difracción de rayos x de los catalizadores luego de su calcinación, en donde es apreciable que la preparación por sol-gel lleva a menores tamaños de partícula para la fase NiO (evidenciado por picos menos intensos y más anchos). De igual forma, también es posible apreciar el efecto dispersor de la fase La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:  $D_{NiO, N-SiO_2-I} = 16,9 \text{ nm} > D_{NiO, NL-SiO_2-I} = 7,6 \text{ nm} \approx D_{NiO, N-SiO_2-SG} = 7,3 \text{ nm} > D_{NiO, NL-SiO_2-SG} = 4,3 \text{ nm}$ .



[1] M. Musso, S. Veiga, F. Perdomo, T. Rodríguez, N. Mazzei, B. Decarlini, P. Portugal, J. Bussi, *Biomass Convers. Biorefinery* (2022).

[2] F. Barzegari, M. Kazemeini, M. Rezaei, F. Farhadi, A. Keshavarz, *Int. J. Hydrogen Energy* 45 (2020) 24840–24858.

## Compostos de nióbio: preparação, caracterização e aplicação em catálise, energia fotovoltaica e piezoelétricos

Sergio Cava, Cátia Ücker, V. Goetzke, Fábio C. Riemke, Daiane Fernandes, Cristiane W. Raubach, Mateus M. Ferrer, Pedro Lovato, Mario L. Moreira

CCAF – Crescimento de Cristais Avançados e Fotônica  
UFPEL – Universidade Federal de Pelotas  
Pelotas, RS, Brasil  
\* sergiocava@gmail.com

O presente trabalho tem como intenção apresentar as atividades científicas e tecnológicas na área de síntese de novos materiais inorgânicos não-metálicos a base de nióbio, para aplicações em energia e fotocatalise, visando desenvolver este setor estratégico. Considerou-se como tema central do presente trabalho, o domínio de processos de síntese e estrutura atômica de materiais inorgânicos a base de Nióbio e suas aplicações em geração de energia, fotocatalise e outras aplicações tecnológicas. Este trabalho apresenta os processos de síntese de Nb estudados pelo grupo de pesquisadores, estimulando a pesquisa básica e aplicada de materiais com desempenho superior, baseado nas características dos mesmos. Os resultados demonstram as vantagens técnicas e econômicas da utilização de compostos a base de nióbio sobre outros materiais. As referências citadas são trabalhos do grupo de autores.

- [1] C.L. Ücker, V. Goetzke, F.C. Riemke, M.L. Moreira, C.W. Raubach, S. Cava. The photocatalytic performance of Fe inserted in Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> obtained by microwave-assisted hydrothermal synthesis: Factorial design of experiments. *J. Photochemistry and Photobiology A-Chemistry*, 435 (2023) 114294.
- [2] D. Fernandes, M.M. Ferrer, C.W. Raubach, M.L. Moreira, P. Lovato, E.C. Moreira, C.O. Graeff, S. Cava. Fast synthesis of NaNbO<sub>3</sub> nanoparticles with high photocatalytic activity for degradation of organic dyes. *J. American Ceramic Society*, 106 (2023) 399-409.
- [3] F.C. Riemke, C.L. Ücker, N.L.V. Carreño, S. Cava, C.W. Raubach. Influence of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> grown on SrTiO<sub>3</sub> nanoseeds in the catalytic oxidation of thioanisole. *Materials Chemistry and Physics*, 278 (2022) 125591.
- [4] C.L. Ücker, F.C. Riemke, V. Goetzke, M.L. Moreira, C.W. Raubach, E. Longo, S. Cava. Facile preparation of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TiO<sub>2</sub> heterostructures for photocatalytic application. *Chemical Physics Impact*, 4 (2022) 100079.
- [5] C.L. Ücker, V. Goetzke, F.C. Riemke, M. Vitale, L.R.Q. Andrade, M. Ücker, E.C. Moreira, M.L. Moreira, C.W. Raubach, S. Cava. Multi-Photonic behavior of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> and its correlation with synthetic methods. *J. Materials Science*, 56 (2021) 7889-7905.
- [6] C.L. Ücker, F.C. Riemke, N.L.V. Carreño, M.L. Moreira, C.W. Raubach, S. Cava, Sergio. Influence of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> crystal structure on photocatalytic efficiency. *Chemical Physics Letters*, 764 (2021) 138271.
- [7] D. Fernandes, C.W. Raubach, P. Lovato, M.L. Moreira, S. Cava. Synthesis of NaNbO<sub>3</sub> nanowires and their photocatalytic activity. *Ceramics International*, 47 (2021) 10185-10188.
- [8] C.L. Ücker, V. Goetzke, S.R. Almeida, E.C. Moreira, M.M. Ferrer, P. Lovato, M.L. Moreira, C.W. Raubach, S. Cava. Photocatalytic degradation of rhodamine B using Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> synthesized with different niobium precursors: Factorial design of experiments. *Ceramics International*, 47 (2021) 20570-20578.
- [9] C.L. Ücker, L.T. Gularte, C.D. Fernandes, V. Goetzke, E.C. Moreira, C.W. Raubach, M.L. Moreira, S. Cava. Investigation of the properties of niobium pentoxide for use in dye-sensitized solar cells. *J. American Ceramic Society*, 102 (2018) 1884-1892.

## Síntese de $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ via rota hidrotérmica assistida por micro-ondas visando aplicação fotocatalítica

Renato de Gouveia Cantoneiro\*<sup>a</sup>, Cátia Liane Ucker<sup>a</sup>, Sérgio da Silva Cava<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Pelotas - RS

\* Renatogouveia2@outlook.com

Diante da crescente necessidade no controle dos resíduos industriais, visando um controle maior de descarte para que afete o mínimo possível o meio ambiente, fez-se necessário formas para remediação de efluentes industriais contaminados e descartados indevidamente [1]. Frente a isso, este trabalho tem como objetivo a síntese do material  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  e analisar sua aplicação em processos fotocatalíticos. Para analisar a capacidade fotocatalítica do material, diversas análises físico-químicas foram realizadas, tais como Difração de Raios-X (DRX), Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), Espectroscopia Raman (RAMAN) e Análise fotocatalítica. Por se tratar de um estudo preliminar, o efluente utilizado foi uma solução simulada com corante Rodamina B de concentração conhecida ( $1 \times 10^5$  M), em que se fosse possível analisar em quanto tempo o material obtido neste trabalho seria capaz de descolorir a solução, e o resultado é apresentado na Figura 1. A análise iniciou analisando o tempo de descoloração natural do corante frente à radiação UV, e passados 60 minutos menos de 10% da concentração do corante foi perdida; o teste seguiu utilizando o  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  majoritariamente amorfo, sem tratamento térmico, que recebeu a abreviatura de TNO, que nos mesmo 60 minutos apresentou um padrão linear de descoloração, chegando ao final da análise com a descoloração de, aproximadamente, 90% do corante; O último resultado obtido, e mais promissor, foi a análise do  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  que passou por tratamento térmico prévio, que recebeu a abreviatura de TNO-TT por ter alcançado estrutura cristalina monoclinica [2], em sua curva é possível verificar que em apenas 15 minutos de teste o material já alcançou uma descoloração de 70% da solução e, em 30 minutos, já havia ocorrido a descoloração de quase todo o corante, o que representa uma descoloração superior à alcançada com o TNO em 60 minutos de análise.

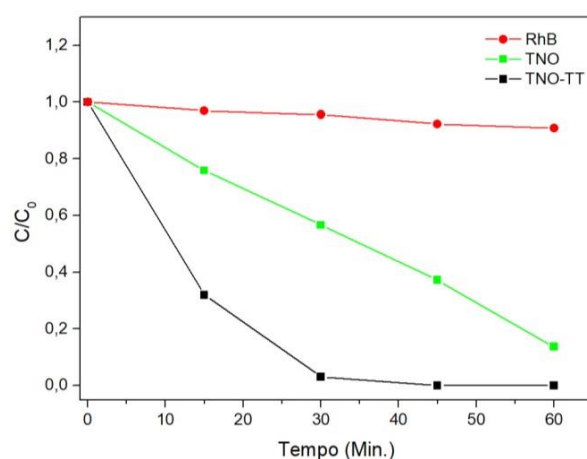


Figura 1 - Curva  $C/C_0$  x Tempo para acompanhar a descoloração do corante Rodamina B.

- [1] ARAÚJO, K. S. et al. Processos oxidativos avançados: uma revisão de fundamentos e aplicações no tratamento de águas residuais urbanas e efluentes industriais. **Revista ambiente e água**, v. 11, n.2, p.387-401.  
 [2] OLIVEIRA, V. S. G. et al. Ultrafast reaction-sintering of grain size-controlled titanium niobate from  $\text{TiO}_2$  and  $\text{Nb}_2\text{O}_5$ . **Ceramic Engineering & Science**, v. 3, n. 6, p. 272-278.

## Propiedades ferroeléctricas y magnéticas de películas epitaxiales de PZT dopadas con Fe/Nb

Lucía Imhoff<sup>a</sup>, Sebastian A. Barolin<sup>a</sup>, Miguel A. Rengifo<sup>a</sup>, José Santiso<sup>c</sup>, Myriam H. Aguirre<sup>b</sup>, Marcelo G. Stachiotti<sup>a</sup>, Nora S. Pellegrini<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física de Rosario IFIR – UNR - CONICET, Bv 27 de Febrero 210 Bis, Rosario 2000, Argentina

<sup>b</sup> Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón INMA – UNIZAR, C Mariano Esquillor s/n, Campus Río Ebro, Zaragoza 50018, España

<sup>c</sup> Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia ICN2, Av de Serragalliners s/n, Campus de la UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona, España

\* [pellegrini@ifir-conicet.gov.ar](mailto:pellegrini@ifir-conicet.gov.ar)

En los últimos años, los materiales multiferroicos han atraído una atención significativa tanto por su comprensión fundamental, como por sus aplicaciones potenciales en una amplia variedad de dispositivos multifuncionales. Es bien sabido que los mecanismos que impulsan la ferroelectricidad y el ferromagnetismo son mutuamente excluyentes, según estudios teóricos, lo que hace que estos materiales sean aún raros y muy interesantes. Entre estos, la incorporación de cationes magnéticos Fe<sup>3+</sup> y Nb<sup>5+</sup> en el Pb(Zr,Ti)O<sub>3</sub>, material ferroeléctrico ampliamente conocido y utilizado, ha mostrado ser una estrategia exitosa para el desarrollo de compuestos multiferroicos tanto en forma de películas gruesas como delgadas. En un trabajo publicado recientemente [1], se muestran resultados prometedores para películas delgadas de (1-x)Pb(Zr<sub>0.52</sub>Ti<sub>0.48</sub>)O<sub>3</sub>-xPb(Fe<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>)O<sub>3</sub> con 0<x<0.5 fabricadas por la técnica sol-gel. Las películas policristalinas obtenidas por el método sol-gel presentan un excelente comportamiento ferroeléctrico y débil comportamiento ferromagnético a temperatura ambiente para composiciones x>0.3.

En el presente trabajo, se crecieron películas delgadas de (1-x)Pb(Zr<sub>0.52</sub>Ti<sub>0.48</sub>)O<sub>3</sub>-xPb(Fe<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>)O<sub>3</sub> (x=0.4, 0.5) sobre sustratos de SrTiO<sub>3</sub> con orientación <100> mediante deposición láser pulsada (PLD).

Para poder realizar la caracterización eléctrica de los materiales, se empleó una capa inferior conductora de SrRuO<sub>3</sub> y se depositaron oro y SrRuO<sub>3</sub> como electrodos superiores. Las películas así obtenidas, presentan crecimiento epitaxial de una excelente calidad cristalina y sin la presencia de fases secundarias. Además, se midieron los comportamientos ferroeléctricos y ferromagnéticos débiles a temperatura ambiente. A partir de estos resultados se realiza una comparación con los obtenidos previamente para muestras policristalinas, como así también se analizará la posibilidad de encontrar un acoplamiento entre las propiedades ferroeléctricas y magnéticas con el objetivo de aplicar estos materiales para el desarrollo de dispositivos.

[1] L. Imhoff, A. Román, S.A. Barolin, N.S. Pellegrini, L.B. Steren, M.H. Aguirre, M.G. Stachiotti., J. European Ceram. Soc., 42(5) (2022), 2282-2289.



## ZnO obtido por síntese verde para aplicação fotocatalítica.

Andriele L. da Rosa<sup>a</sup>, Bruno Arruda, Cristiane W. Raubach<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Pelotas

andrielelange@hotmail.com

Atualmente, nosso planeta sofre com a poluição em diversas áreas, dentre as quais a contaminação de mananciais por corantes industriais pode ser destacada [1].

Uma solução que vem se mostrando promissora para essa questão é a fotocatalise heterogênea, onde um material semicondutor é utilizado como catalisador na reação de degradação de poluentes. Dentre os diversos semicondutores que podem ser utilizados, o óxido de zinco (ZnO) que se destaca por sua atividade fotocatalítica [2].

Existem diversas rotas de obtenção desse óxido, mas na biossíntese, utilizam-se extratos vegetais como redutores de sais de zinco, eliminando a necessidade de produtos químicos para essa função [3]. No presente trabalho foi utilizado o extrato de noz pecã para complexação dos íons de zinco e como precursor foi usado nitrato de zinco ( $Zn(NO_3)_2$ ), a solução de extrato natural com ( $Zn(NO_3)_2$ ), ficou sob agitação por 4 horas a temperatura de 50°C, após passou por secagem em estufa por 24 horas e por calcinação a 450°C.

Esse material foi produzido com o objetivo de ser aplicado em fotocatalise heterogênea para a degradação de corantes industriais.

[1] A. Rafiq, M. Ikram, Photocatalytic degradation of dyes using semiconductor photocatalysts to clean industrial water pollution. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, [S.l.], v.97, p.111–128, 2021.

[2] E. F. Souza, M. B Porto, Comparação dos processos de síntese e do desempenho de fotocatalisadores para a degradação do corante rodamina B. *Engenharia Sanitária e Ambiental*, [S.l.], v.23, p.791–799, 2018.

[3] P. Basnet, S. Chatterjee, Structure-directing property and growth mechanism induced by capping agents in nanostructured ZnO during hydrothermal synthesis—A systematic review. *Nano-Structures & Nano-Objects*, [S.l.], v.22, p.100426, 2020.

**Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>@Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> materials for the catalytic wet air oxidation of Phenol**

Fábio C. Riemke\* <sup>a,b</sup>, Cátia Ucker <sup>b</sup>, Bruno Rosa <sup>b</sup>, Milena Cerveira <sup>b</sup>, Lucas da Silva Rodrigues <sup>c</sup>, Mateus G. Masteghin <sup>d</sup>, Mahdi Bourassi <sup>a</sup>, Catherine Especel <sup>a</sup>, Gwendoline Lafaye <sup>a</sup>, Laurence Vivier <sup>a</sup>, Cristiane W. Raubach <sup>b</sup>, Neftali L.V. Carreno <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers (IC2MP), Université de Poitiers, CNRS, 4 rue Michel Brunet, F-86073 Poitiers FR*

<sup>b</sup> *Universidade Federal de Pelotas, rua Gomes Carneiro n° 1 – Pelotas BR*

<sup>c</sup> *Universidade Federal do ABC - Avenida dos Estados, 5001 – Santo André-SP BR*

<sup>d</sup> *University of Surrey - Guildford, Surrey UK*

\* fabio.riemke@gmail.com

Niobium pentoxide (Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) is a widely explored metal oxide with applications covering all aspects of materials science, such as solid electrolytic capacitor and photocatalyst devices. Although this higher oxygen content stoichiometry presents great chemical stability, it is capable of reacting with different organic substances to generate by-products following catalytic reactions [1]. In this work, we have synthesized core-shell oxides by using commercial R-3c aluminum oxide (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) as the nucleus and a nano-shell of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> as the superficial active layer. The batches were divided into three sets, one with no surfactant introduced during the synthesis and other two with different quotas of sodium dodecyl sulfate SDS (Al:Nb:SDS= 1:1:1/150 and 1:1:1/30, respectively). The performances of these materials for the catalytic wet air oxidation of phenol experiments demonstrate that such heterojunction is comparable to pristine Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> particles. The X-ray diffraction (XRD) analysis showed similar spectra with sharp peaks corresponding to the crystalline Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and more than 90% of nanocrystalline domains identified as the Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. The Brunauer–Emmett–Teller (BET) analysis depicted a strong decrease in the surface area by the addition of SDS, ranging from 300 m<sup>2</sup>/g to 51.7 m<sup>2</sup>/g. Nevertheless, such alterations do not seem to have impacted the overall catalytic performance based on the material surface sites. In addition, the magnitude of the Lewis acid sites determined by ammonia temperature-programmed desorption (TPD) technique demonstrated that the addition of SDS has contributed to strengthen the acidity of the materials either by the increase on the number of acidic sites or its intensities. This observation was endorsed by the model reaction of 3,3-dimethyl-but-1-ene isomerization in which the catalytic Brønsted acid sites were favored using SDS. Finally, inductively coupled plasma (ICP) analysis demonstrated that both the core-shell catalysts and pristine Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> have exhibited high chemical stability in the catalytic wet air experiments with less than 0.2% of Al<sup>3+</sup>/Nb<sup>5+</sup> ions found in solution during a high-pressure (20 bar O<sub>2</sub>) experiment carried out for 6h at 160 °C.

[1] C.L. Ücker, V. Goetzke, F.C. Riemke, M.L. Vitale, L.R.Q. de Andrade, M.D. Ücker, E.C. Moreira, M.L. Moreira, C.W. Raubach, S.S. Cava, Multi-Photonic behavior of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> and its correlation with synthetic methods, *J. Mater. Sci.* 56 (2021) 7889–7905.

## Redução de Cromo por fotocatalise heterogênea auxiliado por Cu-TiO<sub>2</sub>

Francielen S. M. Rodrigues \*<sup>a</sup>, Cátia L. Ücker<sup>a</sup>, Mateus M. Ferrer<sup>a</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Pelotas, UFPEL – RS

\* francielensmr2@hotmail.com

O maior constituinte do planeta Terra é a água e esse vem enfrentando diversos problemas devido ao crescimento populacional e a má gestão envolvendo os recursos hídricos associados a industrialização [1]. Como fonte de contaminação encontradas nos corpos hídricos podem ser íons metálicos e, ou então compostos orgânicos, dos quais como uma dessas formas de poluente encontra-se os metais tóxicos, podendo serem citados o chumbo, mercúrio, cádmio, cromo, dentre outros [2,3]. O cromo, está presente em dois estados oxidativos mais estáveis, o trivalente Cr<sup>+3</sup> e o hexavalente Cr<sup>+6</sup>. Quando no estado trivalente, esse elemento não apresenta grandes problemas ambientais e sociais comparado ao estado hexavalente, no qual acarreta em preocupações pelas suspeitas de carcinogenicidade [4]. Tendo em vista a gravidade do problema, algumas técnicas foram desenvolvidas para auxiliar na resolução ou então minimização de impactos associados a essas fontes de contaminações, e para tal, o conjunto de técnicas Processos Oxidativos Avançados (POAs), traz algumas opções de estudo que podem ser testados em função dessa problematização. Assim, a técnica de fotocatalise heterogênea, pertencente a esse conjunto, ocorre pelo mecanismo físico-químico que parte da incidência de uma fonte de radiação sobre a superfície de um material com características semicondutoras, provocando a redução ou quebra de cadeia do poluente, assim, minimizando o impacto [5]. Para esse estudo o semicondutor de ensaio foi o Cu-TiO<sub>2</sub> com adição de cobre na rede, variando os percentuais de impureza nos valores de 0%, 0,5%, 1% e 2%. Esse material foi obtido através da rota de síntese Hidrotérmica Assistida por Micro-ondas, e caracterizado posteriormente por Difração de Raios-X (DRX) para identificação das fases cristalinas dos semicondutores, Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) para visualização da morfologia dos pós, Espectroscopia no Ultravioleta Visível (UV-Vis) para a medida de band gap do material, seguido da avaliação do percentual de redução do cromo pela fotocatalise heterogênea, auxiliada pelo material Cu-TiO<sub>2</sub>.

[1] SILVA, M. F.; PINEDA, E. A. G.; BERGAMASCO, R. Aplicação de óxidos de ferro nanoestruturados como adsorventes e fotocatalisadores na remoção de poluentes de águas residuais. Química Nova, [S.l.], v.38, p.393–398, 2015.

[2] ZENG, G.-M. et al. Micellar-enhanced ultrafiltration of cadmium and methylene blue in synthetic wastewater using SDS. Journal of hazardous materials, [S.l.], v.185, n.2-3, p.1304–1310, 2011.

[3] ABBASI, A.; MORADPOUR, T.; Van Hecke, K. A new 3D cobalt (II) metal-organic framework nanostructure for heavy metal adsorption. Inorganica Chimica Acta, [S.l.], v.430, p.261–267, 2015.

[4] KAKAVANDI, B. et al. Enhanced chromium (VI) removal using activated carbon modified by zero valent iron and silver bimetallic nanoparticles. Journal of environmental health science and engineering, [S.l.], v.12, n.1, p.1–10, 2014

[5] ÜCKER, C. L. et al. Photocatalytic degradation of rhodamine B using Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> synthesized with different niobium precursors: factorial design of experiments. Ceramics International, [S.l.], v.47, n.14, p.20570–20578, 2021.

## Caracterización fisicoquímica y electroquímica de MnO<sub>x</sub> obtenido por vía solvotermal para incorporación sobre carbones activados

Patrice Portugau <sup>\*a</sup>, Jorge Castiglioni <sup>a</sup>, Eduardo Méndez <sup>b</sup>

<sup>a</sup>Área Fisicoquímica-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Gral. Flores 2124, 11800 Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup>Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

\* portugau@fq.edu.uy

El empleo de los óxidos de manganeso (MnO<sub>x</sub>) en diversos campos de aplicación como la combustión catalítica, almacenamiento electroquímico de energía y electrocatalisis se debe principalmente a la búsqueda de materiales con bajo costo de obtención y buen desempeño para sustituir a los materiales convencionales basados en metales nobles (Pt, Rh, Pd) [1]. En general, los óxidos a emplear se encuentran soportados o en contacto con un material carbonoso, típicamente carbón activado. La obtención de MnO<sub>x</sub> puede llevarse a cabo a partir de un precursor adecuado mediante tratamiento térmico en atmósferas controladas, mediante proceso solvotermal, entre otros. El proceso solvotermal resulta atractivo ya que permite la obtención del óxido en condiciones moderadas de temperatura (menores a 200 °C) en contraste con la obtención por tratamiento térmico que implica temperaturas superiores a 400 °C. Esto toma relevancia cuando se busca incorporar el óxido sobre un carbón activado, ya que estos se queman en presencia de oxígeno a temperaturas superiores a 400 °C. En este trabajo fue sintetizado un MnO<sub>x</sub> empleando Mn(Ac)<sub>2</sub> como precursor en una solución 50:50 (v/v) H<sub>2</sub>O:isopropanol. La fase obtenida fue caracterizada mediante difracción de rayos X (DRX), espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y análisis termogravimétrico. Asimismo, la caracterización electroquímica se realizó mediante voltamperometrías cíclicas (a velocidades de barrido de 10, 20, 30, 40 y 50 mV/s). Las medidas electroquímicas se realizaron en una celda de tres electrodos empleando Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> como electrolito soporte y un electrodo de referencia de Ag|AgCl|KCl<sub>(sat)</sub>. Los resultados obtenidos por DRX muestran que la fase obtenida se corresponde con Hausmannita (Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) donde el manganeso se encuentra en estado de oxidación +3 y +2. Asimismo, en el espectro se observan bandas a números de onda bajos en 626 cm<sup>-1</sup>, 525 cm<sup>-1</sup> y 411 cm<sup>-1</sup>, atribuibles a la vibración Mn-O. En cuanto a la caracterización electroquímica, en la medida que se incrementa la ventana de potencial hacia potenciales más altos respecto al OCP no se observan picos en el voltamperograma. Sin embargo, al incrementar la ventana de potencial hacia valores más pequeños que el OCP aparece un pico en el barrido catódico a un potencial de 0,267 mV vs ENH, atribuible a la reducción del óxido a Mn<sup>2+</sup>. Asimismo, luego en el barrido anódico se observa la aparición de un pico en 733 mV vs ENH el cual es atribuible a la oxidación de Mn<sup>2+</sup> a Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Las principales conclusiones del trabajo son que fue posible obtener Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub> mediante un proceso solvotermal que hace posible su incorporación sobre carbones activados. Asimismo, se pudo determinar el rango de potenciales donde la fase de manganeso obtenida es estable y por tanto se hace factible emplearla como fase activa de un electrocatalizador.

[1] Zhou, Z. G., Du, H. M., Dai, Z., Mu, Y., Tong, L. L., Xing, Q. J., ... & Zou, J. P. (2019). Degradation of organic pollutants by peroxymonosulfate activated by MnO<sub>2</sub> with different crystalline structures: Catalytic performances and mechanisms. *Chemical Engineering Journal*, 374, 170-180.

## Desempeño de catalizadores MnOx soportados sobre SiO<sub>2</sub> obtenida de cáscara de arroz *olimar* en la combustión catalítica de propano

Martin Torres\* <sup>a</sup>, Mauricio Cardoso <sup>a</sup>, Patrice Portugau <sup>a</sup>, Carolina De Los Santos <sup>a</sup>, Jorge Castiglioni <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Físicoquímica-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Gral. Flores 2124 CC 1157, 11800 Montevideo, Uruguay.

\* mtobru@fq.edu.uy

Los objetivos del milenio dejan clara la necesidad de desarrollar nuevos materiales que permitan un sistema productivo más sostenible. En este contexto los residuos de cáscara de arroz (CA) se posicionan como potenciales para ser aprovechados gracias a su gran abundancia y composición. Esta se destaca por su alto contenido de cenizas, lo cual implica una desventaja para su aprovechamiento energético. Sin embargo, dentro de dicha composición inorgánica, la cual ronda por el 20-21 % de peso de la muestra, se encuentra en un 90% óxido de silicio (SiO<sub>2</sub>) en forma amorfa. Las características físicoquímicas de esta SiO<sub>2</sub> amorfa obtenida tras la quema directa a temperaturas inferiores a 800 °C, no son algo por lo cual se la suele distinguir para su uso. Pero, tras un tratamiento adecuado es posible modificar dichas características para ser utilizada en procesos tales como adsorción, biomedicina, cromatografía líquida, electrónica y aplicaciones industriales muy importantes tales como catalizadores heterogéneos. Aunque la fabricación de SiO<sub>2</sub> está ampliamente documentada, no es una tarea sencilla obtenerla como un material mesoporoso. En el presente trabajo, se ha elaborado SiO<sub>2</sub> mesoporosa obtenida de CA uruguaya, variedad *Olimar*, mediante la calcinación directa a 600 °C por 2 h. Las cenizas fueron disueltas en NaOH 4 M (1:10) para disolver selectivamente el SiO<sub>2</sub> y posteriormente reprecipitarlo empleando HCl (5 M), formándose un gel que se lavo varias veces hasta pH constante y conductividad inferior a 50 μScm<sup>-1</sup>. Posteriormente, se calcinó nuevamente a 600 °C por 2 h, con el fin de eliminar residuos acumulados. Con el sólido obtenido, y con el fin de evaluar su aplicación a la eliminación de un compuesto orgánico volátil (COV) y gracias a la elevada reactividad de los óxidos de manganeso (MnOx) en la eliminación de COVs [1], se elaboraron catalizadores conteniendo esta especie, variando la carga de especie activa y obteniendo porcentajes de 10, 30 y 40 % en peso de MnOx sobre SiO<sub>2</sub>. Se caracterizaron los catalizadores por fisisorción en N<sub>2</sub>, DRX, análisis elemental y MEB. Por último, se evaluó su actividad catalítica en un reactor empleando una alimentación de 128 mL min<sup>-1</sup>, conteniendo Ar (79.5 %), O<sub>2</sub> (19.5 %) C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> (1 %) y se realizó el seguimiento de los productos por cromatografía de gases. Los resultados (ver Fig. 1) muestran que cargas de 40MnOx-CAO permiten conversiones superiores a 90 % de C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> a temperaturas de 425 °C con 100 % de rendimiento a CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O.

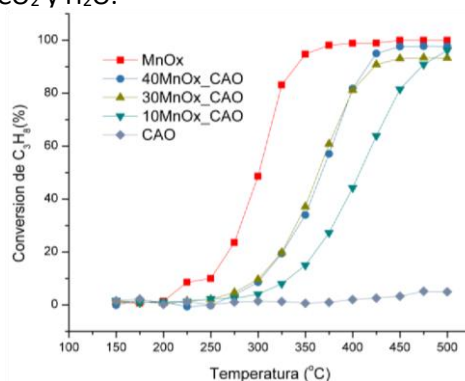


Figura 1- Curvas light off de conversión de C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>

[1] Torres, M., de los Santos, C., Portugau, P., Yeste, M. D. P., & Castiglioni, J. (2021). Applied Clay Science, 201, 105935.

## Síntesis de material mesoporoso a base de arcilla y su evaluación en la fotodegradación de bisfenol A

Hans Salinas\*<sup>a</sup>, Valeria Basin<sup>a</sup>, Antonella Torrano<sup>a</sup>, Camila Pérez<sup>a</sup>, Sofía Durand<sup>a</sup>, Mariano Romero<sup>b</sup>, Andrea De León<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Físicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

\* hansfranco11@gmail.com

Los avances tecnológicos en la adsorción, la catálisis y la liberación controlada de drogas, requieren materiales porosos con una estructura adecuada según la aplicación. En este sentido, las nanoestructuras híbridas derivadas de las arcillas son materiales de creciente interés debido a sus características estructurales y sus aplicaciones funcionales. Recientemente, se ha reportado la preparación de materiales arcillosos con estructuras mesoporosas mediante la incorporación de sílice entre las láminas de la arcilla, que tienen potencial aplicación como catalizadores, adsorbentes y matrices porosas para el encapsulado de moléculas. Esto ha motivado el presente trabajo, en el que se planteó como objetivo la síntesis, a partir de una montmorillonita natural, de un material mesoporoso adecuado como catalizador en el proceso tipo foto-Fenton heterogéneo aplicado a la degradación de bisfenol A (BPA).

Una montmorillonita natural nacional, previamente molida y tamizada, se modificó mediante intercambio iónico con  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ , el surfactante bromuro de cetiltrimetilamonio (CTAB) y tetraetoxisilano (TEOS) como fuente de sílice, seguido de tratamiento térmico en aire a 500 °C. Se utilizaron las técnicas de caracterización: análisis termogravimétrico, isothermas de adsorción-desorción de  $\text{N}_2$  de nitrógeno, DRX y DRS en el UV-Vis. La actividad catalítica del material se evaluó en un foto-reactor batch irradiado con LEDs que emiten en el rango visible. Se realizaron ensayos en condiciones tipo foto-Fenton y complementarios (adsorción, Fenton y fotólisis), aplicados a la remoción de BPA en agua.

Los resultados del análisis por DRX muestran un aumento del espaciado basal de la arcilla debido a la incorporación de CTAB y TEOS en el espacio interlamilar. Luego del tratamiento térmico para eliminar el surfactante, el material tiene un área BET de  $437 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$  y un tamaño medio de poro de 15.9 nm, observándose una isoterma de adsorción-desorción de  $\text{N}_2$  con ciclo de histéresis, característico de sólido mesoporoso. Además, el análisis por DRS mostró capacidad de absorción de luz en el rango UV-Vis. Los resultados de la evaluación catalítica se muestran en la Figura 1. A partir de estos, se puede concluir que el material mesoporoso con hierro sintetizado a partir de la arcilla resultó activo en la fotodegradación de BPA con luz visible.

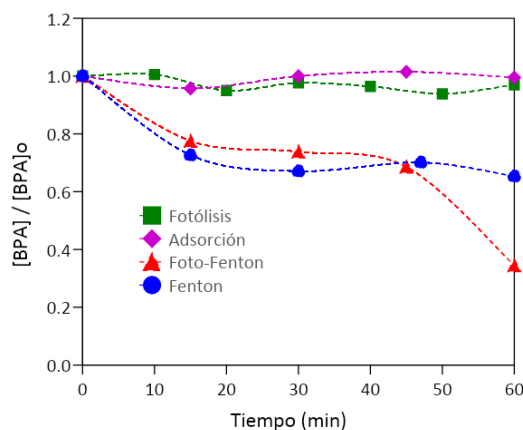


Figura 1. Resultados de los ensayos catalíticos.

## Diseño de catalizadores de níquel para la producción de gas de síntesis a partir del tri-reformado de biogás

Santiago G. Veiga<sup>\*,a,d</sup>, Mariano Romero<sup>b</sup>, Darío J. Segobia<sup>c</sup>, Carlos R. Apesteguía<sup>c</sup>, Juan A. Bussi<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratorio de Físicoquímica de Superficies, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Uruguay.

<sup>b</sup> Laboratorio de Cristalografía y Química del Estado Sólido, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Uruguay.

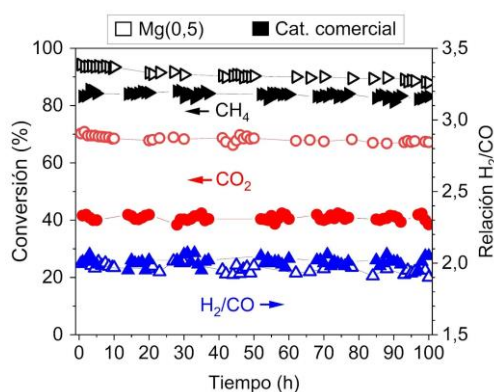
<sup>c</sup> Grupo de Investigación en Ciencias e Ingeniería Catalíticas (GICIC), INCAPE (UNL- CONICET), Argentina.

<sup>d</sup> Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

\* sveiga@fq.edu.uy

El biogás es uno de los combustibles renovables más extendidos, que se obtiene a partir de la degradación anaerobia de materia orgánica de diferentes orígenes, y está compuesto principalmente por CH<sub>4</sub> (50-75%) y CO<sub>2</sub> (25-50%) con otros componentes minoritarios. Una alternativa, actualmente en estudio para su valorización, consiste en la producción de gas de síntesis (GS) a partir del proceso de tri-reformado (TR). El TR es una combinación de tres reacciones que tienen lugar en un único reactor: reformado con vapor, reformado seco y oxidación parcial de CH<sub>4</sub>. La principal ventaja de este proceso es la obtención de un GS (H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>) que puede ser posteriormente utilizado para la producción de metanol, dimetiléter o combustibles líquidos mediante la síntesis Fischer-Tropsch. Sin embargo, para la futura aplicación del TR a escala industrial, es necesario contar con un catalizador activo y resistente a los fenómenos de desactivación (formación de carbón, sinterización y re-oxidación). En un trabajo anterior se sintetizó mediante el método de Pechini modificado un catalizador de níquel (12% p/p) soportado sobre La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> presentando buena actividad en el TR de biogás [1]. Con la finalidad de aumentar la basicidad del catalizador, y con esto mejorar la adsorción de CO<sub>2</sub>, se incorporó magnesio a la estructura del óxido según: La<sub>2-x</sub>Mg<sub>x</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7-δ</sub> (con x=0,25, 0,5, 0,75 y 1). Los catalizadores fueron caracterizados por isotermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub>, reducción térmica programada, difracción de rayos X, contenido de níquel por ICP-AES, desorción térmica programada de CO<sub>2</sub> y SEM-EDS. Los catalizadores fueron evaluados en el TR de biogás, trabajando a 800 °C con una relación molar CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O/O<sub>2</sub> = 3/1/1/0,25. El catalizador x=0,5 fue el que presentó mejor actividad y menor deposición de carbón atribuido a una cantidad óptima de magnesio que implica una basicidad y reducibilidad adecuadas. Con este catalizador se estudió la cantidad de agua necesaria en la alimentación para obtener un GS (H<sub>2</sub>/CO=2). Con esta alimentación (CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O/O<sub>2</sub> = 3/1/2/0,25) se realizó un ensayo de estabilidad durante 100 horas y se comparó el desempeño con un catalizador comercial cuyos resultados se muestran en la figura adjunta.

En este trabajo se presentó una estrategia para diseñar un catalizador económicamente viable, capaz de soportar las condiciones exigentes del proceso de TR, para su aplicación potencial en la valorización de biogás para la producción sostenible de GS.



[1] S Veiga, M. Romero, R. Faccio, J. Bussi, Mater. Lett., 293 (2021) 129724.

## Biogenic synthesis of zinc oxide nanoparticles and its application in photocatalytic depolymerization of Kraft lignin

Joelis Vera <sup>\* a</sup>, Wence Herrera <sup>b</sup>, Edward Hermosilla <sup>c,d</sup>, Marcela Díaz <sup>c,d</sup>, Javiera Parada <sup>c,d</sup>, Gonzalo Tortella <sup>c,d</sup>, Olga Rubilar <sup>c,d</sup>

<sup>a</sup> Programa de Doctorado en Ciencias de la Ingeniería Mención Bioprocesos, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>b</sup> Programa de Doctorado en Recursos Naturales, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>c</sup> Centro de Excelencia en Investigación Biotecnológica Aplicada al Medio Ambiente (CIBAMA-BIOREN), Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>d</sup> Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

\* j.vera12@ufromail.cl

Conversion of residual lignin into chemically valuable products through environmentally friendly processes at mild reaction conditions is one of the challenges facing the still emerging bioeconomy. In this scenery, heterogeneous photocatalytic processes for lignin valorization stand out due to its potential to provide a cleaner and more sustainable alternative. This process uses electromagnetic radiation and a photocatalyst to generate highly reactive species with a capacity of decompose a wide range of organic compounds at standard atmospheric conditions. Zinc oxide nanoparticles (ZnO-NPs) in the form of a fine aqueous suspension has been one of the most utilized catalytic systems for lignin depolymerization because of its thermal stability, biocompatibility, low cost, ease of fabrication and high lignin conversion rate (>80%). However, the use of chemical method for synthesis of these catalytic systems reduces environmental sustainability of photocatalytic processes. In this regard, green synthesis of nanoparticles is a safer alternative to usual chemical and physical methods due to the use of environmentally friendly reagents as reducing and capping agents, decreasing the risk of releasing toxic residues into the environment. Considering this, the aim of this work was to evaluate the biogenic synthesis of ZnO-NPs in the photocatalytic depolymerization of Kraft lignin (KL). Aqueous leaf extract of *Aristotelia chilensis* was used for nanoparticles synthesis. Zetasizer, XRD and TEM confirmed the obtaining of ZnO-NPs with monodispersed size distributions ( $13.619 \pm 3.705$  nm) and zeta potential value of -15 mV, which provides moderate dispersion stability. ZnO-NPs were also synthesized by traditional chemical methods (ZnO-Ch) to compare and evaluate the characteristics of the biosynthesized nanoparticles (ZnO-B). The progress of photodegradation at pH 12, under UVA light and artificial sunlight for 24 h was monitored by change in the UV-visible absorption spectrum. The prepared ZnO-B evidenced good photocatalytic performance for the degradation of KL. After 24 h the KL degradation was observed to be  $\approx 92\%$  under UVA light, which was more effective compared to ZnO-Q ( $\approx 37\%$ ). The use of artificial sunlight allowed obtaining result comparable to that obtained with UV-A light. In this sense, sunlight utilization as a cost-effective energy source can contribute to the practicability of photocatalytic techniques. Acknowledgment: FONDECYT 1191089 and ANID/FONDAP/15130015



## Obtenção da heteroestrutura $\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5$ e $\text{SiO}_2/\text{ZnS}$ utilizando $\text{SiO}_2$ da cinza da casca de arroz para aplicação fotocatalítica

Suelen R. Almeida\* <sup>a</sup>, Cátia L. Ücker<sup>a</sup>, Cristiane W. Raubach <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal de Pelotas, UFPEL, RS - Brasil*

\* [suelen.rs@hotmail.com](mailto:suelen.rs@hotmail.com)

As indústrias estão buscando alternativas para reduzir o impacto ambiental dos resíduos em processos industriais e agrícolas para minimizar os poluentes e possibilitar a transformação de resíduos em novos produtos [1]. Dentre esses produtos, o arroz é um alimento consumido mundialmente. Da produção total de arroz, aproximadamente 20% correspondem à sua casca tornando-se um potencial poluidor de resíduos de biomassa [2]. Para isso, utilizou-se a sílica para a formação de uma heteroestrutura sendo obtida pela queima da casca de arroz sem a utilização de tratamentos prévios ou posteriores. A obtenção de heteroestruturas de  $\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5$  e  $\text{SiO}_2/\text{ZnS}$  pelo método hidrotérmico assistido por micro-ondas foi constituída de forma rápida e em baixa temperatura. A sílica obtida possui uma fase amorfa, e os materiais utilizados para a modificação são característicos do tipo de síntese utilizada [3]. Imagens SEM mostram que  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  e  $\text{ZnS}$  interagiram com a superfície de  $\text{SiO}_2$ , preenchendo os vazios. No processo fotocatalítico, as heteroestruturas apresentaram aumento na eficiência de descoloração dos corantes utilizados neste trabalho, como RhB e MB, em relação ao  $\text{SiO}_2$  [4]. Para RhB, a sílica descoloriu aproximadamente 24%, e para MB, descoloriu aproximadamente 27%;  $\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5$  descoloriu 91,24% RhB e 72,77% MB, enquanto  $\text{SiO}_2/\text{ZnS}$  descoloriu aproximadamente 96% para RhB e 100% para MB. Todas as amostras foram consideradas ao mesmo tempo. Isso mostra que além de melhorar a atividade fotocatalítica das heteroestruturas, há uma valorização do aproveitamento do resíduo da casca de arroz, o que favorece a redução de resíduos descartados incorretamente.

[1] Unglaube et al Chemistry Open 10 (2021)

[2] You et al.; Ind Crop Prod (2021) 170:113687. Dominic et al.; Sustain Mater Technol 32 00427 (2022)

[3] Hu G, Yang J, Duan X, et al (2021) Recent developments and challenges in zeolite-based composite photocatalysts for environmental applications. Chem Eng J 417:129209.

[4] Akhter et al.; Phys Chem Res 11:1–8 (2023)

## ***Loofah sponge* impreganada com Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> para aplicação em fotocatalise heterogênea**

Cátia L. Ücker\* <sup>a</sup>, Francielen S. M. Rodrigues<sup>a</sup>, Renato G. Cantoneiro <sup>a</sup>, Vitor Goetzke <sup>a</sup>, Cristiane W. Raubach <sup>a</sup>, Sergio Cava <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal de Pelotas, UFPEL, RS - Brasil*

\* *catiaucker@gmail.com*

A fotocatalise heterogênea é uma técnica que vem sendo amplamente utilizada na degradação de poluentes orgânicos principalmente encontrados em efluentes oriundos de indústrias [1]. Semicondutores de óxidos cerâmicos são utilizados como catalisadores do processo de fotocatalise, auxiliando para a obtenção de maiores eficiências. O Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> é um material semicondutor usado em diversas tecnologias, devido a suas interessantes propriedades químicas e físicas, com boa estabilidade térmica e com amplo band gap [2]. Na fotocatalise, o Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> vem sendo estudado e aperfeiçoado com a finalidade de encontrar maiores eficiências de degradação de corantes orgânicos [3]. Mesmo sendo um material que apresenta bons resultados, a ideia da impregnação do Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> em suportes fotocatalíticos pode auxiliar em maiores eficiências de degradação, visto que a área superficial será maior, possibilitando maior área de contato com o corante [4]. Um dos métodos para a produção desse material é pela síntese hidrotérmica assistida por micro-ondas, que possibilita a rápida impregnação e o uso de temperaturas baixas. Assim, esse trabalho mostra a impregnação de Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> em bucha vegetal através do método de síntese hidrotérmica assistida por micro-ondas, com a finalidade de utilização do material como suporte fotocatalítico em processos de degradação do corante Rodamina B. A temperatura de síntese foi de 130°C, utilizando-se 3 diferentes tempos (15, 30 e 60 min). O Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> impregnado na bucha tem característica de apresentar baixa cristalinidade da fase pseudo-hexagonal, o que é predominante para materiais não submetidos a tratamento térmico. Pelas imagens MEV verifica-se que há a impregnação do Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> na superfície da bucha. Os resultados preliminares de fotocatalise, indicam que o suporte de bucha vegetal com a impregnação de Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> apresenta boa eficiência de degradação da RhB, sendo capaz de degradar 100% do corante em 20 minutos de processo fotocatalítico. Em comparação com outras tecnologias e trabalhos, esse trabalho mostra resultados de rápida e grande eficiência de descoloração de corantes, favorecendo os estudos na área da fotocatalise heterogênea.

[1] P. Chen et al.; J Nanopar Res, 15 (2013) 1465-1476.

[2] C. Ücker et al.; J Am Ceram Soc, 102 (2019) 1884-1892.

[3] C. Ücker et al.; Ceram Int, 47 (2021) 20570-20578.

[4] E. M. Rangel et al.; J Clean Prod, 371 (2022) 133231

## **A06 – Energía y sostenibilidad**

---

**A06 – P01 al P11 – Jueves**

**A06 – P12 al P25 - Viernes**

## Predicción de la espontaneidad de inyección electrónica al fotoánodo desde el pigmento, en una celda DSSC

Mauricio F. Ávila <sup>a\*</sup>, María F. Cerdá <sup>b</sup>

<sup>a,b</sup> Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Udelar  
Iguá 4225 Esq. Mataojo C.P. 11400, Montevideo, Uruguay

\*maniavila@gmail.com

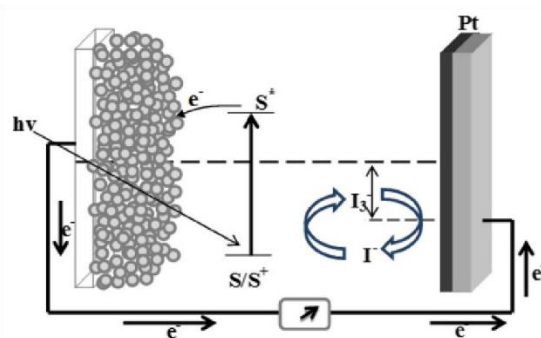
En la actualidad, se precisan muchísimos recursos energéticos, para satisfacer las exigencias de la vida moderna de los seres humanos. Gran parte de éste, sigue siendo fuertemente dependiente de los combustibles fósiles tradicionales [1]. Por lo tanto, es necesario migrar hacia tecnologías verdes y limpias para un futuro ecológicamente sostenible. Entre los recursos de estas características, la energía solar es muy atractiva dado que es potencialmente ilimitada [2].

Entre los diversos tipos de celdas solares, las celdas solares sensibilizadas por pigmentos (*Dye-Sensitized Solar Cells* –DSSC-) son celdas prometedoras debido a su bajo costo [3], [4] y a que pueden ser directamente integradas a los edificios mediante la tecnología BIPV (Building Integrated Photovoltaics) o BIPV/T (Building Integrated Photovoltaics/Thermal) ya que al ser traslúcidas permiten la transmisión de la luz del día, concomitantemente a la producción de electricidad. Además, pueden ser utilizada en dispositivos portátiles e incluso integrada a textiles, debido a la posibilidad de ensamblarlas en soportes flexibles [5].

En una celda DSSC, los electrones de las moléculas de pigmento son excitadas por la luz, pasando al estado excitado ( $S \rightarrow S^*$ ). Estas moléculas, adquieren el potencial redox adecuado, para cederlos a la banda de conducción del  $\text{TiO}_2$ . Luego los electrones se mueven del fotoánodo al cátodo. El ciclo finaliza con el intercambio de electrones entre el pigmento en su estado excitado con la cupla redox, regresando al estado fundamental. Así el proceso puede volver a comenzar (**Figura 1**) [6].

La ecuación de Rehm-Weller [7] permite conocer la energía libre de inyección de los electrones desde el pigmento al fotoánodo, a partir de los potenciales de reducción y oxidación del  $\text{TiO}_2$  y el pigmento respectivamente (adicionalmente se precisa conocer la energía de transición electrónica en el nivel vibracional más bajo del pigmento).

Por lo anterior, podríamos predecir que pigmentos naturales podrían ser candidatos a ser buenos sensibilizantes de celdas tipo DSSC, desde su  $\Delta G$ .



**Figura 1:** Funcionamiento de una celda DSSC

[1] Wang, Z.X.; Ye, D.J. "Forecasting Chinese carbon emissions from fossil energy consumption using non-linear graymultivariable models". J. Clean. Prod. 142(2017): 600–612.

- [2] Breyer, C. et al. "Solar photovoltaics demand for the global energy transition in the power sector". *Prog. Photovolt.* 26(2018): 505–523.
- [3] Han, L. et al. "Novel D-A-pi-A type benzocarbazole sensitizers for dye sensitized solar cells". *J. Mol. Struct.* 1180(2019): 651–658.
- [4] Ye, M.D. et al. "Recent advances in dye-sensitized solar cells: From photoanodes, sensitizers and electrolytes to counter electrodes". *Mater. Today.* 18(2015): 155–162.
- [5] Biyik, E. et al. "A key review of building integrated photovoltaic (BIPV) systems". *Engineering Science and Technology, an International Journal.* 20(2017): 833–858.
- [6] Ludin, N.A. et al. "Review on the development of natural dye photosensitizer for dye-sensitized solar cells". *Renew.Sustain. Energy Rev.* 31(2014): 386–396
- [7] Rehm, D.; Weller, A. "Kinetics of fluorescence quenching by electron and H-atom transfer" *Israel Journal of Chemistry.* 8(1970): 259-271.

## Síntesis de nanoplásticos mediante precipitación con antisolvente

Martín Benzo<sup>a</sup>, María Eugenia Pérez-Barthaburu<sup>a</sup>, Andrés Pérez-Parada<sup>a</sup>, Álvaro Olivera<sup>a</sup>, Laura Fornaro<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Grupo de Desarrollo de Materiales y Estudios Ambientales - Departamento de Desarrollo Tecnológico - Centro Universitario Regional Este – Universidad de la República – Ruta 9 y Ruta 15, Rocha, Uruguay.

\*martin.benzo@cure.edu.uy

Los micro y nanoplásticos (MNP) son contaminantes emergentes cuya presencia en las matrices ambientales es de interés actual. La validación y estandarización de metodologías analíticas que permitan identificarlos y cuantificarlos aún están en proceso, y las tecnologías que se enfocan en su remoción de diferentes matrices aún están en desarrollo [1]. La producción de materiales de referencia que reproduzcan las características de los MNP hallados en muestras reales es de gran utilidad para estos dos fines [2], debido a que hay pocas opciones disponibles comercialmente. La precipitación con antisolvente consiste en la disolución del plástico en un solvente orgánico y su posterior precipitación con otro solvente (miscible con el primero) en el cual el polímero es insoluble. El único antecedente de aplicación de una metodología similar para síntesis de MNP de referencia se enfoca en el polietilentereftalato (PET) [3]. En el presente trabajo, se sintetizaron inicialmente partículas de polietileno (PE) virgen, disolviéndolo en tolueno a 80°C y precipitándolo con etanol. Se realizaron experiencias sin y con surfactante (Tween 60), obteniéndose partículas en la escala nanométrica ( $D=329 \pm 93$  y  $509 \pm 235$  nm respectivamente). La caracterización por TEM y las distribuciones de diámetro de partícula obtenidas a partir del análisis de imágenes (software FIJI) mostraron que el agregado de surfactante produce partículas significativamente más grandes pero de morfología más homogénea (fig. 1a y 1b). Los resultados se confirmaron con SEM y DLS. En una segunda etapa se sintetizaron partículas a partir de residuos de poliestireno (PS) y polipropileno (PP). El PP se disolvió en xileno a 120°C y se precipitó con etanol, mientras que el PS se disolvió en acetona a 25°C y se precipitó con agua. Las caracterizaciones por TEM y el análisis de las imágenes obtenidas muestran la obtención de partículas en la escala nanométrica ( $D=126 \pm 37$  nm para PS y  $201 \pm 73$  nm para PP, fig. 1c y 1d). La precipitación con antisolvente es una técnica sencilla, rápida, económica y versátil, que permite la obtención de nanoplásticos para su uso como material de referencia para validación de técnicas analíticas y evaluación de tecnologías para la remoción de MNP en aguas.

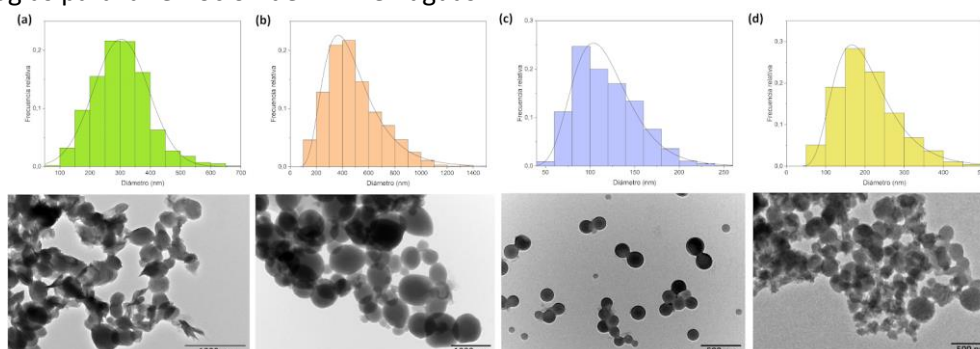


Figura 1 – Distribuciones de diámetro de partícula e imágenes de TEM de (a) PE precipitado sin surfactante, (b) PE precipitado con 2% Tween 60, (c) PS, (d) PP.

[1] L. Wang et al., J. Hazard. Mater., 401 (2021) 337–339, doi: 10.1016/j.fmre.2021.05.001.

[2] J. Seghers et al., Anal. Bioanal. Chem. (2021) doi: 10.1007/s00216-021-03198-7.

[3] A. G. Rodríguez-Hernández et al., Environ. Sci. Nano, 6 (2019) 2031–2036, doi: 10.1039/c9en00365g

## On the benefits of microwave calcination to synthesize high performance Mg-doped $\text{Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{O}_2$ as cathode for sodium-ion batteries

Mauricio Bomio<sup>\*a</sup>, Pedro Lavela<sup>b</sup>, Ricardo Luis Tranquilin<sup>c,d</sup>, Elson Longo<sup>c</sup>, Fabiana Villela da Motta<sup>a</sup>

<sup>a</sup>LSQM – Laboratory of Chemical Synthesis of Materials – Department of Materials Engineering, Federal University of Rio Grande do Norte – UFRN, P.O. Box 1524, Natal, RN, Brazil

<sup>b</sup>Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Universitario de Química Fina y Nanoquímica, Universidad de Córdoba, Edificio Marie Curie, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba, Spain

<sup>c</sup> CDMF-LIEC, Federal University of São Carlos, Department of Chemistry, P.O Box 676, São Carlos, SP 13565-905, Brazil

<sup>d</sup> Postgraduate Program in Biotechnology and Innovation in Health – University Anhanguera São Paulo (UNIAN), 05145-200 São Paulo, SP, Brazil

\* E-mail: mauricio.bomio@ufrn.br

Sodium-ion batteries (SIBs) are emerging as promising electrochemical devices for large-scale energy storage [1]. To achieve longer lifetime SIBs that meet industrial targets, a wide understanding of the interaction of all the cell components and the development of optimal electrode active materials is necessary [2]. Several families of compounds that meet these requirements have been recently proposed to improve the SIBs performance, notably layered transition metal oxides [3]. Solids with the  $\text{Na}_x\text{TMO}_2$  nominal stoichiometry, where TM is a transition metal, are well-known suitable materials. Depending on the stacking of the O layers, two main structures named O3-type and P2-type are typically studied. Particularly, P2- $\text{Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{O}_2$  provides excellent specific capacities and stability due to their high theoretical capacity, air endurance, structural stability during charge/discharge processes, and high ion diffusion coefficient [4]. Nevertheless, adverse effects such as surface degradation, coexistence of P2 and O-phases, and Na<sup>+</sup>/vacancy ordering during Na<sup>+</sup> intercalation/deintercalation lead to capacity decay and limit its applicability [5]. The P2-O2 two-phase transition occurring over four volts is particularly detrimental for stable cycling at high voltage. It can be dramatically relieved by doping with several transition metal elements, such as Zn<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, or Mg<sup>2+</sup> [6], among others.

In this study, microwave calcination is proposed as an alternative to conventional heating in an electric furnace to provide high-performance electrodes for sodium-ion batteries. The short annealing time was compatible with the preparation of pure and highly crystalline Mg-doped  $\text{Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{O}_2$  samples. The kinetic response of the electrode samples at three distinct stages of the galvanostatic cycling evidenced the better electrochemical performance of the microwave calcined samples as compared with a reference sample prepared by conventional heating procedures.

[1] Y.-B. Niu, Y.-J. Guo, Y.-X. Yin, S.-Y. Zhang, T. Wang, P. Wang, S. Xin, Y.-G. Guo, *Adv. Mater.*, 32 (2020) 2001419-2001427.

[2] N. Tapia-Ruiz, et. al, *J. Phys.: Energy*, 3 (2021), 031503-031592

[3] F. Wei, Q. Zhang, P. Zhang, W. Tian, K. Dai, L. Zhang, J. Mao, G. Shao J. *Electrochem. Soc.*, 168 (2021), 50524-50538

[4] X. Wu, S. Jin, Z. Zhang, L. Jiang, L. Mu, Y.-S. Hu, H. Li, X. Chen, M. Armand, L. Chen, *X. Huang Sci. Adv.*, 1 (2015), e1500330-e1500339

[5] M.J. Aragón, G.F. Ortiz, P. Lavela, J.L. Tirado, J.D.C. Oliveira, F.V. Motta, M.R.D. Bomio, *J. Alloys Compd.*, 789 (2019), 1035-1045.

[6] N. Yabuuchi, R. Hara, K. Kubota, J. Paulsen, S. Kumakura, S. Komaba *J. Mater. Chem. A*, 2 (2014), 16851-16855

## Ligas metálicas comerciais como eletrocatalisadores para a produção de gás hidrogênio em meio líquido iônico.

Yan C. Carneosso<sup>a</sup>, Márcio S. Góes<sup>a</sup>, Janine P. Botton<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu / PR, Brasil*

yc.carneosso.2019@aluno.unila.edu.br

O gás hidrogênio é considerado uma alternativa energética, pois, mesmo não sendo uma fonte de energia primária, isto é, precisando ser produzido por outra fonte, ele possui características apropriadas para a transição energética dos combustíveis fósseis para as fontes de energia mais limpas.[1] Entre as metodologias de produção foi utilizado a eletrólise da água, que faz o uso de metais nobre como eletrocatalisadores.[2] Assim, este trabalho tem como objetivo testar novos materiais eletrocatalisadores em busca de um sistema estável, de elevada eficiência e baixo custo. Os testes foram realizados com variação dos eletrodos de trabalho. Como contraeletrodo e eletrodo de quase referência foram utilizados fios de platina. A área superficial do eletrodo de trabalho foi limitada com a finalidade de calcular a densidade de carga, densidade de corrente e controlar o volume real de gás produzido.[3] O eletrólito consistiu em uma solução aquosa de KOH 1,0 mol/L. Os materiais utilizados como eletrodo de trabalho foram ligas comerciais, produzidas no Brasil, contendo Si, Fe, Cr, Ni e respectivas variações. As técnicas eletroquímicas utilizadas foram Voltametria Cíclica (VC) e Cronoamperometria (CA). Para as medidas de CA, a diferença de potencial escolhida foi de -1,7 V. Para efeito de comparação, além das ligas utilizadas na caracterização, os testes foram realizados com um eletrodo de platina (Pt). Considerando os valores obtidos, a liga que teve maior desempenho foi M400, este eletrodo apresentou maior valor de densidade de carga (5,03 cC/cm<sup>2</sup>) e corrente (28,0 μA/cm<sup>2</sup>), apresentando-se como uma alternativa mais eficiente que a Pt no sistema eletroquímico utilizado, em sua composição há grande quantidade de Ni e Cu. A Pt obteve densidade de carga de 3,66 cC/cm<sup>2</sup> e densidade de corrente de 20,2 μA/cm<sup>2</sup>. O AISI 410 teve o segundo melhor resultado no quesito densidade de corrente, apresentando uma boa densidade de carga, ambos pouco inferior a Pt. As ligas HC 276 e AISI 420 apresentaram resultados pouco expressivos. A liga ER4043 sofreu corrosão imediata quando entrou em contato com a solução eletrolítica, o que o caracterizou como não apropriado, logo não foi possível a conclusão dos testes. A pesquisa encontra-se em desenvolvimento e em aprimoramento dos resultados, mas já é possível observar resultados promissores com os dados obtidos.

[1] TICIANELLI, Édson Antônio e GONZALEZ, Ernesto Rafael. Eletroquímica: princípios e aplicações. São Paulo: EDUSP, 1998.

[2] DINCER, Ibrahim. Green methods for hydrogen production. International Journal of Hydrogen Energy, [s. l.], v. 37, ed. 2, p. 1954-1971, Janeiro 2012.

[3] Botton, J. P. - LÍQUIDOS IÔNICOS COMO ELETRÓLITOS PARA REAÇÕES ELETROQUÍMICAS. Dissertação (Doutorado em Ciência dos Materiais); UFRGS. Abril, 2007.



## Efeito do revestimento antirreflexivo na eficiência de célula fotovoltaica

Ramon D. Carvalho\*<sup>a</sup>, Cristian D. Fernandes<sup>a</sup>, Pedro L. G. Jardim<sup>a</sup>, Mateus M. Ferrer<sup>a</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>, Cristiane Raubach<sup>a</sup>, Mario L. Moreira<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Pelotas, Pelotas-RS, Brasil

\*carvalho.rd@ufpel.edu.br

Neste trabalho, apresentamos um método de desenvolvimento de um revestimento antirreflexivo de amplo espectro, depositado em substrato de vidro, por meio do processo de modificação de superfície “etching”. A aplicação proposta para este revestimento ocorre no vidro de cobertura de célula solar, cujo objetivo é suprimir as perdas por reflectância na interação da luz do sol com o vidro que cobre o dispositivo fotovoltaico [1]. Tais perdas por reflectância podem alcançar 8 %, o que causa impacto direto na eficiência da célula solar. A metodologia tem início pela síntese do óxido de alumínio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) pelo método sol-gel, seguida pela deposição do filme a partir da técnica de imersão “dip-coating”, com velocidade de retirada de 2 mm/s. Logo a seguir, o filme fino foi submetido ao tratamento térmico a 400 °C por 10 min, e seguido da modificação de superfície em água fervente, com tempo de imersão de 2 s. E então, foram realizadas as caracterizações de espectroscopias de transmitância e reflectância, microscopia eletrônica de varredura para avaliar as estruturas da superfície do filme fino e finalizamos com a caracterização elétrica da célula fotovoltaica de silício monocristalino para a obtenção dos parâmetros fotovoltaicos, densidade de corrente de curto circuito ( $J_{sc}$ ), fator de preenchimento (FF) e potencial de conversão energética (PCE). Os resultados da espectroscopia de transmitância e reflectância mostraram que os filmes com maiores transmitâncias foram 256 s, 512 s, 1024 s que, conseqüentemente, apresentaram menores reflectâncias. O filme 256 s apresentou transmitância média de 99,5 % na região do visível (420 - 680 nm), para a região total mensurada, o qual apresentou média de 98,86 % de 350 até 1000 nm. Por vez, o filme 512 s apresentou uma transmitância média de 99,34 % na região do visível e 98,8 % de 350 até 1000 nm. Para o caso do filme 1024 s, o resultado foi de 99,32 % no visível e 98,74 % na região de 350 até 1000 nm. Os três revestimentos apresentaram reflectância total média em torno de 0,5 % na região do espectro visível. O PCE obtido pela célula solar coberta com vidro foi de 18,70 %. A célula coberta com o filme 256 s apresentou PCE de 20,11 % o que representa um aumento de 7,5 %, na comparação com o dispositivo coberto com o vidro. Com o filme 512 s, o PCE foi 20,31 % com incremento de 8,60 %. Por fim, para o filme 1024 s o PCE foi 20,53 % e o aumento foi de 9,70 %. Portanto, os revestimentos antirreflexivos apresentaram uma excelente transmitância devido ao processo de modificação de superfície, que possibilitou um revestimento com índice gradual de refração [2]. E este aumento da eficiência da célula, está relacionado com a maior quantidade de luz que chega até a superfície do dispositivo, que é maior quando comparados com o vidro, tendo a transmitância evidenciado este ponto.

[1] K. C. S. Reddy, C. Chingakham, B. Gupta, M. S. Prasad, S. R. Atchuta, S. Sakthivel, Solar Energy, 190 (2019) 119-125.

[2] S. Sutha, S. Suresh, B. Raj, K.R. Ravi, Solar Energy Materials & Solar Cells, 165 (2017) 128–137.

## Eletr deposição de Filmes Finos de Cu<sub>2</sub>O em Substrato Flexível

Gustavo S. Dalenogare\*<sup>a</sup>, Camila M. Cholant<sup>a</sup>, Mateus M. Ferrer<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas – UFPEL - RS

\* gustavodalenogare@gmail.com

Em 2021, o Ministério de Minas e Energia brasileiro apresentou, em relatório anual, que o crescimento na demanda de energia elétrica se deu em 5,7% em relação ao ano anterior [1]. Assim como diversos avanços tecnológicos e crescimento populacional são esperados, desperta-se a necessidade e o interesse na pesquisa em produção de energia elétrica de forma renovável. Deste modo, a pesquisa em óxido de cobre I (Cu<sub>2</sub>O) é justificada, pois o material apresenta qualidade de semicondutor tipo p, com bandgap variando entre 1,09 até 2,2 eV [2] e diversas morfologias, tendo revelado promissoras qualidades para uso em célula solar e produção de hidrogênio. Os materiais utilizados neste estudo são sulfato de cobre (Dinâmica, 98%), ácido cítrico (Synth, 99,5%), ácido láctico (Synth, 85~90%) e hidróxido de sódio (Synth, 97%). Como substrato para deposição nesta pesquisa, também se explorou o comportamento do ITO-PET com resistividade  $R_s \leq 10\Omega$ . Além disso, um potenciostato/galvanostato modelo Autolab PGSTAT 302N foi empregado nas eletr deposições. Utilizando configuração padrão de três eletrodos, estabelece-se uma célula eletrolítica com ITO-PET como eletrodo de trabalho, e uma placa de platina e um fio de prata como contra eletrodo e eletrodo de referência, respectivamente. Os filmes produzidos mostram-se promissores em sua qualidade e facilidade de produção. Um dos resultados mais interessantes foi obtido utilizando uma solução de ácido cítrico, com pH 11 em deposição de uma hora. Como mostra a figura 1, o difratograma de raios-x indica uma fase pura de Cu<sub>2</sub>O com alto grau de cristalinidade. Ainda, demais análises indicam bandgap de 1,88 eV, valor interessante para a aplicação em produção de energia e hidrogênio.

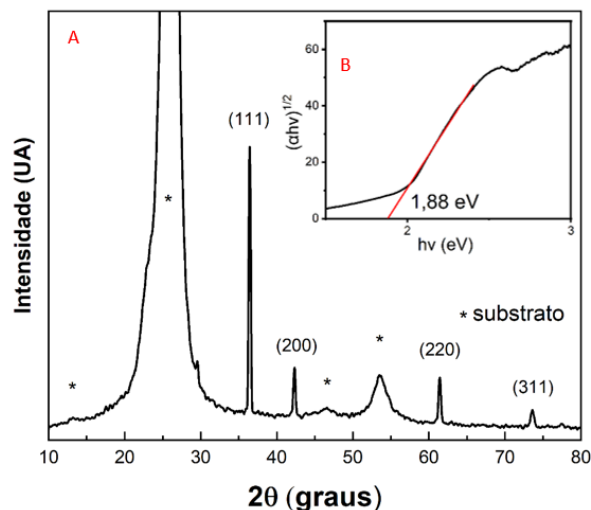


Figura 1 - A) Difratograma de raios-x e B) Estimativa do bandgap por ensaio de reflectância

[1] Ministério de Minas e Energia. Empresa de Pesquisa Energética - EPE. **Balço Energético Nacional 2022**. Rio de Janeiro, 2022.

[2] E.F. Rakotonarivo, et al. Optimization of the electrodeposition of the pure and cobalt doped copper oxide for solar cells and other applications. *Physica B: Condensed Matter*, 609 (2021) 412783.

## Modelado de nanohilos $\text{H}_2\text{TiO}_3$ derivados de $\text{K}_2\text{TiO}_3$ y $\text{RbTiO}_3$ como materiales con aplicaciones fotovoltaicas.

Martín Esteves<sup>a</sup>, Luciana Fernández-Werner<sup>a</sup>, Ricardo Faccio<sup>a</sup>, Álvaro W. Mombrú<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Área Física, Facultad de Química, Udelar.

\* mesteves@fq.edu.uy

Los sistemas unidimensionales derivados del óxido de titanio y titanatos son sistemas de interés para el estudio fundamental de las propiedades físicas y químicas en la nanoescala [1,2]. En este trabajo presentamos la estructura electrónica, las propiedades mecánicas y ópticas de nanohilos derivados de los titanatos  $\text{K}_2\text{TiO}_3$  y  $\text{RbTiO}_3$  de composición  $\text{H}_2\text{TiO}_3$ . Estos nanohilos estrictamente se encuentra en la escala subnanométrica (“angstrom scale”) y presentan la característica de estar conformador por poliedros  $[\text{TiO}_5]$  que comparten aristas en el caso de  $\text{K}_2\text{TiO}_3$  y vértices en  $\text{RbTiO}_3$ , por lo que se explorarán los efectos causados por el diferente tipo de conectividad. Es importante destacar que estas nanoestructuras son de especial interés ya que se ha logrado preparar nanohilos  $\text{H}_2\text{TiO}_3$  por exfoliación del material bulk  $\text{K}_2\text{TiO}_3$  en medio ácido [3], por lo que no se trata meramente de un material hipotético.

El estudio fue realizado mediante “density functional theory”(DFT) [4, 5] y “tight binding density functional theory (DFTB)”[6] a partir de los materiales bulk antes mencionados, aislando una cadena y realizando una sustitución entre el catión presente en la estructura original y protones. Los modelos estructurales propuestos demuestran ser localmente estables según el análisis de fonones, y se puede inferir que la estructura unidimensional se conserva esencialmente. Las propiedades mecánicas sitúan a estos nanohilos como materiales flexibles, que podría ser utilizados en sustratos poliméricos manteniendo sus propiedades electrónicas. Además, se exploró la capacidad de estos sistemas para ser sensibilizado por la molécula de catecol. Finalmente se discutirá la capacidad del sistema sensibilizado para inyectar electrones del colorante de catecol al nanohilo bajo exposición a la luz visible.

- [1] M. Esteves, L. Fernández-Werner, P. Bechthold, R. Faccio, Á.W. Mombrú, *ChemistrySelect*, 7 (2022)
- [2] L. Fernández-Werner, E. A. González, R. Faccio, A.W. Mombrú, *J. Phys. Chem. C* 2018,
- [3] Y. Masubuchi, R. Miyazaki, H. Kikuchi, T. Motohashi and S. Kikkawa, *Dalton transactions*, 2014, **43**, 13751-13755.
- [4] G. Kresse, J. Furthmüller, *Physical Review B*, 54 (1996)
- [5] G. Kresse, J. Furthmüller, *Computational Materials Science*, 6 (1996)
- [6] B. Hourahine, B. Aradi, V. Blum, F. Bonafé, A. Buccheri, C. Camacho, C. Cevallos, M.Y. Deshayé, T. Dumitrică, A. Dominguez, S. Ehlert, M. Elstner, T.v.d. Heide, J. Hermann, S. Irle, J.J. Kranz, C. Köhler, T. Kowalczyk, T. Kubař, I.S. Lee, V. Lutsker, R.J. Maurer, S.K. Min, I. Mitchell, C. Negre, T.A. Niehaus, A.M.N. Niklasson, A.J. Page, A. Pecchia, G. Penazzi, M.P. Persson, J. Řezáč, C.G. Sánchez, M. Sternberg, M. Stöhr, F. Stuckenberg, A. Tkatchenko, V.W.-z. Yu, T. Frauenheim, *The Journal of Chemical Physics*, 152 (2020) 124101.

## Avaliação de superfícies da perovskita $\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$ via Teoria do Funcional da Densidade

Brenda A. M. Fragoso\*<sup>a</sup>, Lorenzo L. Castagno<sup>A</sup>, Gustavo S. Delenogare<sup>A</sup>, Mateus M. Ferrer A

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, UFPEL – RS

\*brendamartinelli@icloud.com

A crescente demanda por energias alternativas é importante para preservação do meio ambiente. Dentro deste assunto, abordagens possibilitadas por alguns semicondutores foi considerada como uma possível solução de baixo custo e sustentável [1]. Dentre os diversos materiais semicondutores, a perovskita é uma classe de materiais que apresentam propriedades optoeletrônicas com grande potencial de aplicação [2]. Novos materiais que fazem parte desta classe vêm sendo sintetizados e estudados, como é o caso das perovskitas à base de haletos [3]. Em particular, a perovskita  $\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$  é um material relevante para diversas aplicações, principalmente sem a toxicidade do chumbo. Porém, ainda é um material que carece de estudos teóricos a fim de dar bases para o entendimento de suas superfícies e as suas contribuições de acordo com as modificações morfológicas. Estudos através da Teoria do Funcional de Densidade (TFD) são usados para estudar a estrutura eletrônica dos materiais cristalinos incluindo informações sobre suas diferentes superfícies. O objetivo deste estudo é realizar simulações de superfícies da perovskita  $\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$ . As simulação computacional foram realizadas através de aproximações periódicas da TFD implementada nopacote computacionls CRYSTAL17 [4]. O entendimento das superfícies expostas contribuem em diversas aplicações como eletrônicas, magnéticas, sensoras, catalíticas, fotovoltaicas, entre outras. Um exemplo de característica estrutural e um mapa do potencial eletrostática da superfície (100) está apresentado na (Fig. 1).

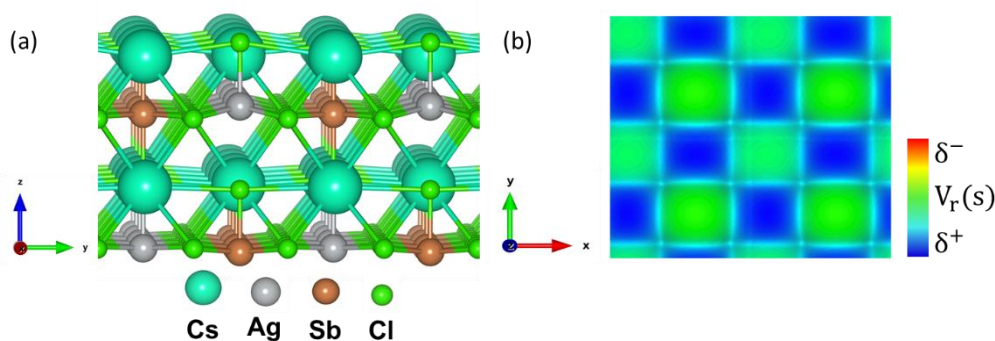


Figura 1: (a) Mapa morfológico e (b) de isosuperfície de potencial eletrostático.

[1] Foteinis, S; Borthwick, A. G. L; Frontistis, Z; Mantzavinis, D; Chatzisyneon, E. Environmental Sustainability of Light-Driven Processes for Wastewater Treatment Applications. Journal Of Cleaner Production, V. 182, P. 8 –15, 2018.

[2] Tong, H. Nano-Photocatalytic Materials: Possibilities and Challenges. Advanced Materials, V. 24, N. 2, P. 229-251, 2012.

[3] Hoefler, S. F.; Trimmel, G.; Rath, T. Progress on Lead-Free Metal Halide Perovskites for Photovoltaic Applications: A Review. Monatsh. Chem., V. 148, P. 795 – 826. 2017.

[4] Dovesi, R; Orlando, R; Erba, A; Zircovich-Wilson, C. M; Civalleri, B; Cassassa, S; Maschio, L; Ferrabone, M; De La Pierre, M; D'arco, P; Noël, Y; Causà, M; Rérat, M; Kirtman, B. Crystal14: A Program for The Ab Initio Investigation of Crystalline Solids. International Journal of Quantum Chemistry, V. 114, P. 1287–1317, 2014.

## Autoensamblado Inducido por Luz en Nanopartículas de $\gamma$ -CsPbI<sub>3</sub> y su Efecto en el Espectro de Fotoluminiscencia.

Daniel L. Gau<sup>a</sup>, Isabel Galain<sup>b</sup>, Ivana Aguiar<sup>b</sup>, Ricardo E. Marotti<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Facultad de Ingeniería, Instituto de Física, Universidad de la República, Herrera y Reissig 565, C.C. 30, 11000 Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup>Área de Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, Av. General Flores 2124, Montevideo, Uruguay.

\* dgau@fing.edu.uy

Durante la última década el estudio de perovskitas de halogenuros metálicos (MHPs) ha despertado un gran interés por el rápido éxito logrado en la implementación de dispositivos optoelectrónicos basados en estos materiales. A pesar de este avance, aún se desconocen muchas de las propiedades fundamentales de las MHPs que permiten su uso en dispositivos de alta eficiencia. Por esta razón, hoy en día el estudio de las propiedades fundamentales de las MHPs se considera esencial para proporcionar información valiosa que guíe el diseño de dispositivos. Recientemente, mediante el uso de técnicas de caracterización espectroscópica de fotoluminiscencia y transmitancia a bajas temperaturas, demostramos el importante impacto que tiene la presencia de excitones - un sistema hidrogenoide formado por un electrón y un hueco - en las propiedades optoelectrónicas de perovskitas inorgánicas en forma de películas y nanopartículas [1,2]. En el presente trabajo estudiamos las propiedades ópticas obtenidas a partir de espectros de fotoluminiscencia de bajas temperaturas de nanovarillas de  $\gamma$ -CsPbI<sub>3</sub> obtenidas a partir de nanopartículas coloidales del mismo material sintetizadas por el método de inyección en caliente. Dichas nanopartículas presentan la capacidad de ensamblarse formando nanovarillas al ser irradiadas con un simulador solar (**Figura 1**) lo que se conoce como autoensamblado inducido por luz. Los resultados muestran que el proceso de autoensamblado no afecta considerablemente la interacción de excitones y fonones pero sí puede afectar negativamente la calidad de la red cristalina.

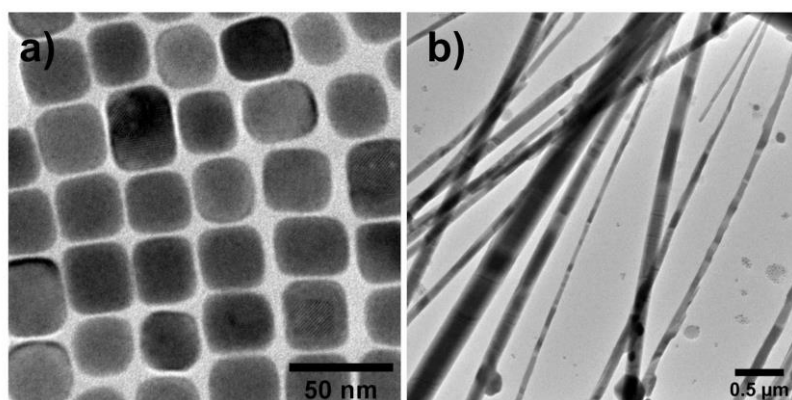


Figura a) Nanopartículas de  $\gamma$ -CsPbI<sub>3</sub> y b) nanovarillas obtenidas de estas obtenidas iluminando con un simulador solar.

[1] D. L. Gau, I. Galain, I. Aguiar, R. E. Marotti, *J. Lumin.* **2023**, 257, 119765.

[2] D. L. Gau, D. Ramírez, F. Iikawa, G. Riveros, P. Díaz, J. Verdugo, G. Núñez, S. Lizama, P. Lazo, E. A. Dalchiale, L. Contreras, J. Idigoras, J. Anta, R. E. Marotti, *ChemPhysChem* **2022**, e202200286.

## Investigação dos Mecanismos de Luminescência em Perovskitas de BaZrO<sub>3</sub> dopadas com Lantanídeos

Daniele G. Mesquita <sup>\*a</sup>, Verônica C. Teixeira<sup>b</sup>, Cristiane R. Ratmann<sup>a</sup>, Mateus Ferrer<sup>a</sup>, Pedro L. G. Jardim<sup>a</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>, Mário L. Moreira<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão, 96160-000, Rio Grande do Sul, Brasil

<sup>b</sup> Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, 13083-100, São Paulo, Brasil

\*mesquitagdani@gmail.com

Os policristais de Perovskitas têm se tornado uma boa alternativa para novas pesquisas de materiais luminescentes, devido às baixas temperaturas necessárias para ocorrer a cristalização [1]. Esses materiais apresentam aplicações em dispositivos eletrônicos associados a filmes finos de policristais cintilantes para imagens de Raios-X [2] e fotoluminescentes em células solares [3], e buscam em seus desenvolvimentos tecnológicos a alta eficiência em conversão de energia. Investigações de compostos de Perovskitas do tipo BaZrO<sub>3</sub> (BZO), sugerem que o band-gap e seus armadilhamentos são grandes responsáveis por emissões de Radioluminescência, e suas formas podem ser controladas em grande parte pelas condições da síntese de nanocristais pelo método Hidrotérmico Assistido por Microondas (HAM) que utiliza baixas temperaturas [4]. Além disso, compostos de BZO dopados com materiais que inserem transições do estado de energia 5d, identificam que propriedades eletrônicas e ópticas deste sistema como a emissão de luminescência à temperatura ambiente podem ser investigadas [5-6]. Ademais, cristais dopados com Lantanídeos têm recebido considerável atenção devido à transição 5d-4f permitidas, como o Cério trivalente (Ce<sup>3+</sup>), havendo bom rendimento de luz e de resolução em energia alcançados em vários materiais, possuindo fenômenos intrínsecos como a luminescência ou fluorescência por meio de processos de conversão ascendente e descendente de energia. Desta forma, este trabalho tem por objetivo investigar as propriedades dos policristais de Perovskitas de BZO dopadas com Lantanídeos do tipo Cério (Ce) e Disprósio (Dy), sintetizadas a partir do método HAM, a fim de compreender os seus mecanismos de luminescência decorrentes do processo de conversão de energia. Amostras de BZO puro foram sintetizadas pelo método HAM, sob a temperatura de 140° C durante 40 min. Essas amostras estão em processo de caracterização utilizando Difração de Raio-X, Espectroscopia de Raman e Microscopia Eletrônica de Varredura para avaliar a formação de fase cristalina, forma, parâmetros de ordem local e determinar o tamanho e distribuição dos cristais. Posteriormente serão sintetizadas e caracterizadas amostras de BZO dopadas com Ce e Dy, com o propósito de permitir a identificação das modificações das estruturas eletrônicas, sua influência com o processo de síntese, estabelecer as correlações com suas propriedades ópticas e investigar os processos de conversão de energia, a serem analisados por meio de medidas de absorção de Raios-X e luminescência para potenciais aplicações na deposição de filmes finos em células solares.

[1] Chen, Q., Wu, J., Ou, X. et al. Nature 561, 88–93 (2018).

[2] Karunakaran, S. K. et al. ACS Sustainable Chem. Eng. 2021, 9, 3, 1035–1060.

[3] H. Y. Jeong et al. ACS Omega 2021, 6, 33224–33230.

[4] M. L. Moreira et al. Scripta Materialia 64 (2011) 118–121.

[5] R.U. Fassbender et al. Phys. Chem. Chem. Phys., 2015,17, 11341-11349.

[6] R.U. Fassbender et al. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 251 (2021) 147106.

## Nanocompósitos de poli(3-hexiltiofeno-2,5-diil) (P3HT) para celdas solares poliméricas

Dominique Mombrú<sup>\*a</sup>, Mariano Romero <sup>a</sup>, Ricardo Faccio<sup>a</sup>, Álvaro W. Mombrú<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Física, DETEMA, Universidad de la República

\* dmombbru@fq.edu.uy

El polímero poli(3-hexiltiofeno-2,5-diil) (P3HT) es el material donador más comúnmente utilizado en la capa activa de las celdas solares poliméricas [1-3]. Por otro lado, el [6,6]-fenil- (C71 o C61)-ácido butírico metil ester fullereno (PCBM) o derivados de fullerenos, son utilizados como aceptor de las mismas [4,5]. Debido al elevado costo y la baja absorción en el espectro visible de los materiales aceptores derivados de fullerenos se ha intentado buscar alternativas con el fin de obtener una mayor absorción de luz y reducir los costos de fabricación [6,7].

Recientemente, se han estudiado sistemas que contienen pequeñas cantidades de GQD para incluirse en la capa activa [8-11]. A su vez, como otra alternativa de material aceptor para la capa activa también se ha estudiado el TiO<sub>2</sub>, es así que se ha reportado sobre la preparación de nanocompósitos poliméricos con nanopartículas inorgánicas, como las de TiO<sub>2</sub>, de bajo costo y amigables con el medio ambiente [12-15].

Es por esta razón que este trabajo se centrará en el estudio de sistemas de P3HT y GQD (dopados con nitrógeno y dopados con nitrógeno y azufre simultáneamente) y también en el estudio de sistemas de P3HT y TiO<sub>2</sub>. Se han preparado dichos nanocompósitos y se han caracterizado estructuralmente mediante difracción de rayos X y espectroscopía Raman. Además, se han realizado medidas de UV-Vis y de espectroscopía de impedancia AC.

- [1] Chi, D. et al. J. Mater. Chem. C 2014, 2, 4383.
- [2] Baek, W-H et al. Sol. Energy Mater Sol. Cells 2009, 93, 1263-1267.
- [3] Ghosekar, I. et al. Semicond. Sci. Technol. 2021, 26, 045005.
- [4] He, Y. et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, 13, 1970–1983.
- [5] Liu, T. et al. Adv. Mater. 2013, 25, 1038–1041.
- [6] Holliday, S. et al. Nature Communications 2016, 7, 11585.
- [7] Pascual-San-Jose, E. et al. J. Mater. Chem. A, 2019,7, 20369-20382.
- [8] Wu, W. et al. ACS Omega. 2019; 4(14), 16159–16165.
- [9] Li, F. et al. NPG Asia Materials 2013, 5, 60.
- [10] Gupta, V. et al. J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 9960–9963.
- [11] Li, Y. et al. Adv. Mater. 2011, 23, 776–780.
- [12] Boucle, J.; et al. Adv. Funct. Mater. 2008, 18, 622–633.
- [13] Lin, Y.-Y.; et al. J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 3644–3649.
- [14] Dridi, C.; et al. Nanotechnology 2008, 19, 375201.
- [15] Kaune, G.; et al. Eur. Phys. J. E: Soft Matter Biol. Phys. 2008, 26, 73–79.

## Sistema biofotovoltaico a partir de cianobacterias y nanopartículas de oro

María Fernanda Cerdá <sup>a</sup>, Florentina Arispe \* <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR. Iguá 4225, 11400 Montevideo, Uruguay*

\* farispe@fcien.edu.uy

En este trabajo se evaluaron las propiedades redox de soluciones de los pigmentos fotosintéticos presentes en cianobacterias, con el objetivo de construir una celda biofotovoltaica, en el cual se obtiene energía a partir de la fotosíntesis oxigénica. Estos sistemas se caracterizan por mantener a los organismos vivos, permitiendo que la maquinaria fotosensible se repare [1]. Se partió de un electrodo de vidrio con FTO como material conductor, para construir una celda de tres electrodos, con platino como contraelectrodo y plata/cloruro de plata como electrodo de referencia. Al electrodo de trabajo se lo modificó incubando durante un día aloficocianina obtenida de extracciones realizadas a partir de cápsulas de *Spirulina* spp. directamente sobre el vidrio y con nanopartículas de oro para mejorar la adhesión. Si bien el uso de nanopartículas ha sido reportado en celdas biofotovoltaicas, no ha sido reportado el uso de nanopartículas de oro [2]. El rol de estas nanopartículas se ve fundamentalmente al medir el circuito a potencial abierto (Fig. 1). En la figura, se alcanzan potenciales más altos cuando se utilizan las nanopartículas de oro para fijar la aloficocianina, además de que son más estables, lo que indica que la proteína se mantiene adherida y no se despegó del electrodo. En consecuencia, el uso de nanopartículas mejora la adhesión de la proteína a la superficie del electrodo de FTO, pudiendo contribuir a la creación de un electrodo más estable y que permita que la celda biofotovoltaica funcione durante más tiempo.

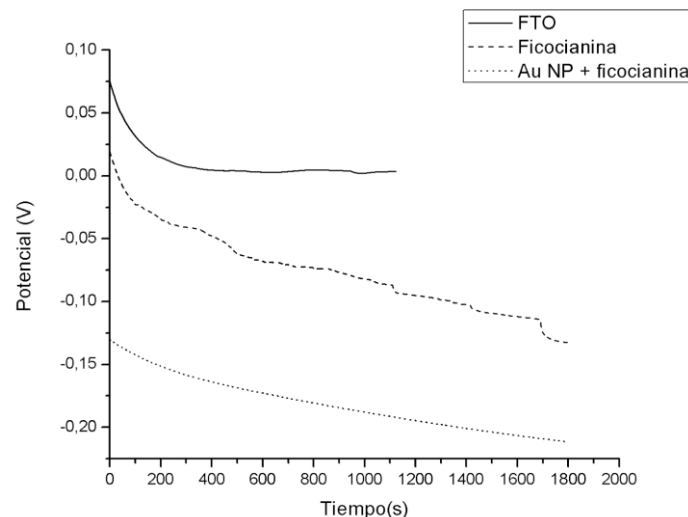


Figura 1. Potencial a circuito abierto en función del tiempo. En línea continua para el electrodo de FTO, en línea discontinua para el electrodo de FTO con ficocianina y en línea punteada el electrodo de FTO con nanopartículas de oro y ficocianina.

[1] L. T. Wey, P. Bombelli, X. Chen, J. M. Lawrence, C. M. Rabideau, S. J. L. Rowden, J. Z. Zhang, C. J. Howe, (2019), *ChemElectroChem*. 6: 5375.

[2] J. Tschörtner, B. Lai, J.O. Krömer, (2019), *Front. Microbiol.* 10:866.



## Sensores eletroquímicos a base de LIG para determinação de glifosato

Raphael D. C. Balboni\*<sup>a</sup>, Bruno V. Lopes<sup>a</sup>, Victoria P. Monks<sup>a</sup>, Lucas M. Gonçalves<sup>b</sup>, Amanda A. Gomes<sup>b</sup>, Neftalí L. V. Carreño<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

<sup>b</sup> Universidade Federal de Pelotas, Bacharelado em Engenharia de Materiais \*

*raphael.balboni@gmail.com*

O agronegócio é um setor crucial para o crescimento econômico no Brasil devido a sua grande extensão e aos diversos fatores climáticos favoráveis [1]. Segundo o Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada (CEPEA), em estudo junto com a Confederação da Agricultura e Pecuária do Brasil (CNA) (2022), o agronegócio em 2021 representou 27,4% do PIB brasileiro, com 68% do valor correspondendo ao setor agrícola, tendo a soja como destaque. Monoculturas plantadas em grandes extensões de terra com a finalidade de produção de commodities, como a soja, cana-de-açúcar e milho, geram impactos ambientais negativos, por exemplo a redução da diversidade biológica presente no local e o consumo intensivo dos nutrientes do solo, sendo muitas vezes necessária que haja a reposição dos nutrientes. Além disso, outro grave problema causado pelas monoculturas está relacionado com o uso de agrotóxicos. Assim, o desenvolvimento de soluções alternativas como sensores de baixo custo se tornam necessárias. Os sensores eletroquímicos são ferramentas analíticas capazes de combinar em um único dispositivo, o elemento de reconhecimento e o de transdução elétrica, possibilitando a detecção e quantificação de baixas concentrações dos analitos [2]. Estes sensores são de baixo custo e de fácil manuseio, facilitando o monitoramento ambiental e assim mitigando danos causados por poluentes do agronegócio. O presente trabalho propõe o desenvolvimento de um dispositivo sensor para monitoramento ambiental do Glifosato, capaz de detectar e quantificar baixas concentrações, apresentando baixo custo e fácil manuseio, através de análises eletroquímicas.

[1] BOMBARDI, L. M. Geografia do Uso de Agrotóxicos no Brasil e Conexões com a União Europeia. São Paulo, 2017.

[2] TYAGI, D., et al. (2020). Recent advances in two-dimensional-material-based sensing technology toward health and environmental monitoring applications. *Nanoscale*, 12(6), 3535-3559.

## Fabrication of PDMS/CNTs/PANI flexible supercapacitor with high energy storage properties

Guilherme Kurz Maron, Raphael Dorneles Caldeira Balboni, Mateus Masteghin, Neftali Lenin Villarreal Carreno

<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brazil e-mail:

*g\_maron@hotmail.com*

The demand for micro-energy storage systems have significantly increased, hence the development of new energy storage technologies has become essential for next generation microelectronics. [1,2] Herein, the development of a flexible supercapacitor based on a facile and low-cost fabrication method that encompasses aligned carbon nanotube arrays (ACNTA)-polyaniline/polydimethylsiloxane electrodes (ACNTA-PANI/PDMS) is reported. The ACNTA were partially embedded in PDMS matrix to ensure adhesion and integration whilst PANI was electrodeposited on its surface to improve energy storage properties. The supercapacitor was characterized by Raman spectroscopy and scanning electron microscopy (SEM). The maximum value of specific capacitance was  $408 \text{ mF cm}^{-2}$  ( $265 \text{ F g}^{-1}$ ) at  $1 \text{ mA cm}^{-2}$ , and a high energy density of  $20 \text{ } \mu\text{W h cm}^{-2}$  ( $25.5 \text{ W h kg}^{-1}$ ) was achieved at a power density of  $100 \text{ } \mu\text{W cm}^{-2}$  ( $126.6 \text{ W kg}^{-1}$ ) for a symmetric two-electrode device. thus, the device showed a good capacitance retention of 76% after 5000 cycles and was able to maintain 80% of its electrochemical properties while being measured at different bending angles, demonstrating excellent properties under extreme conditions.

[1] M. Wang, Y. Ma, J. Ye, Controllable layer-by-layer assembly of metal-organic frameworks/polyaniline membranes for flexible solid-state microsupercapacitors, *J. Power Sources*. 474 (2020) 228681. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228681>.

[2] W. Song, J. Zhu, B. Gan, S. Zhao, H. Wang, C. Li, J. Wang, Flexible, Stretchable, and Transparent Planar Microsupercapacitors Based on 3D Porous Laser-Induced Graphene, *Small*. 14 (2018) 1–7. <https://doi.org/10.1002/smll.201702249>.

## Evaluación de pigmentos derivados de cianobacterias como posibles sensibilizadores en celdas DSSC

Tatiana Montagni\*<sup>a</sup>, María F Cerdá<sup>a</sup>, Sylvia Bonilla<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratorio de Biomateriales, Facultad de Ciencias, Udelar, Iguá 4225, 11400 Montevideo, Departamento de Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup>Sección Limnología, Facultad de Ciencias, Udelar, Iguá 4225, 11400 Montevideo, Departamento de Montevideo, Uruguay

\* tmontagni@fcien.edu.uy

Las celdas solares de Grätzel o DSSC fueron reportadas por primera vez en 1991 por Brian O'Regan y Michael Grätzel [1]. Inspiradas en el proceso de fotosíntesis, por el cual las plantas son capaces de captar energía lumínica para producir su alimento, las celdas de Grätzel la aprovechan para producir corriente eléctrica. Su funcionamiento es gracias a que contienen una capa de material semiconductor como el dióxido de titanio ( $\text{TiO}_2$ ) con colorantes adsorbidos en su superficie capaces de captar energía en el rango visible del espectro excitando sus electrones y transfiriéndolos al  $\text{TiO}_2$ . El  $\text{TiO}_2$  a su vez, se coloca sobre un óxido transparente conductor, a través del cual se ilumina la celda y se pone en contacto con una solución de electrolito que contiene una cupla redox ( $I^- / I_3^-$ ). El circuito se cierra con un contra electrodo de platino.

En este trabajo se utilizarán como colorantes sensibilizantes a extractos alcohólicos de pigmentos lipídicos provenientes de tres cepas de cianobacterias (E5, D3267 y MVCC19, del ártico canadiense, Brasil y Uruguay, respectivamente). Las cepas fueron cultivadas con temperatura controlada y altas intensidades de luz para estimular la producción de carotenoides glicosídicos. Se les realizarán diferentes técnicas de caracterización (fig. 1), entre ellas: espectroscopía UV-Visible, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y voltamperometría cíclica. Por último, se armarán las celdas y se evaluará su eficiencia de conversión energética.

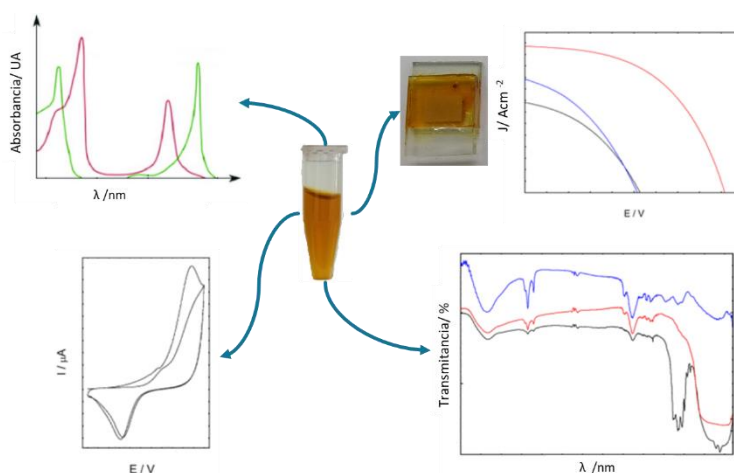


Fig. 1: Esquema de las técnicas de caracterización.

[1] B. O'Regan, M. Grätzel, Nature, 353 (1991), 737-740.

## Desenvolvimento de filmes antirreflexivos depositados por imersão para cobertura de célula fotovoltaica

Ramon D. Carvalho\*<sup>a</sup>, Cristian D. Fernandes<sup>a</sup>, Pedro L. G. Jardim<sup>a</sup>, Mateus M. Ferrer<sup>a</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>, Cristiane Raubach<sup>a</sup>, Mario L. Moreira<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Pelotas, Pelotas-RS, Brasil

\*carvalho.rd@ufpel.edu.br

Neste trabalho, apresentamos uma metodologia para o desenvolvimento de um filme antirreflexivo de banda larga depositado em substrato de vidro, incorporando porosidade nestes filmes e a sua aplicação como vidro solar na cobertura de célula solar comercial de silício mono cristalino. Assim, será avaliado o incremento de transmitância do filme em relação ao vidro liso e também, na aplicação, será analisada a influência destes filmes nos parâmetros fotovoltaicos da célula, como: fator de preenchimento “FF” e eficiência. A composição deste filme antirreflexivo é  $\text{SiO}_2\text{-BaF}_2$  e o método de síntese utilizado foi o sol-gel, sendo a deposição do filme por meio de deposição por imersão “Dip-coating”, onde variamos a velocidade de emersão de 0,5 mm/s até 4 mm/s. Após a deposição, os filmes depositados foram submetidos ao tratamento térmico a 100 °C por 1 h. Foi medida a transmitância e reflectância total do filme após tratamento térmico e também do substrato de vidro. Em seguida, as células solares foram encapsuladas com os filmes e o substrato citados e submetidas a medições elétricas, densidade de corrente curto circuito ( $J_{sc}$ ) x volts, para determinação do FF e eficiência. Quanto aos resultados de transmitância na região do visível (400-800 nm), os filmes com diferentes velocidades de emersão: 0,5 mm/s com 92,9%; 1 mm/s com 93,9%; 2 mm/s com 95,9%; 3 mm/s com 95,7%; 4 mm/s com 96,0% e vidro de substrato com 91,8%. O filme apresenta uma melhoria de, aproximadamente, 4,5% na transmitância na região visível em comparação com o substrato de vidro. O aumento da transmitância ocorreu devido à inserção de porosidade que está relacionada à formação *in situ* de ácido HF. Portanto, a porosidade contribuiu para a redução gradual do índice de refração do filme  $\text{SiO}_2\text{-BaF}_2$ , e estas condições influenciam na supressão da reflectância que, por sua vez, contribui para um aumento da transmitância. Em seguida, a eficiência e o desempenho do FF da célula fotovoltaica foi avaliado com o dispositivo coberto com o substrato de vidro e para cada um dos filmes com diferentes velocidades de emersão.

## Síntesis de TiO<sub>2</sub> negro mediante plasma de agua para aplicaciones con energía solar

Melisa Olivera Rohrer \*<sup>a</sup>, Luciana Fernández Werner<sup>b</sup>, Andrea De León<sup>a</sup>, Ricardo Faccio<sup>b</sup>, Juan Bussi Lasa<sup>a</sup>

<sup>a</sup> LAFIDESU, Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República (Udelar).  
Avenida General Flores 2124

<sup>b</sup> Centro NanoMat/ CryssMat-Lab. & Grupo Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República (Udelar). Avenida General Flores 2124.

\* molivera@fq.edu.uy

El objetivo de este trabajo es contribuir al desarrollo de semiconductores basados en TiO<sub>2</sub> para fomentar el aprovechamiento de la energía solar. La importancia de los semiconductores activos bajo radiación solar radica en que ofrecen una alternativa renovable para la degradación de contaminantes mediante fotocatalisis heterogénea y, también, para la producción de hidrógeno mediante disociación de agua, entre otras aplicaciones.

El TiO<sub>2</sub> negro obtenido mediante plasma de agua [1] es un material prometedor porque su síntesis ha sido poco explorada; no hay antecedentes en el país, es un material que presenta absorción en el espectro visible [2], y puede obtenerse de forma sencilla y limpia.

En este trabajo, para sintetizar TiO<sub>2</sub> mediante plasma de agua, se realiza una electrólisis de descarga luminiscente por contacto, CGDE (Contact Glow Discharge Electrolysis) [3], cuya celda electroquímica consiste en un ánodo de titanio metálico, que es el precursor de la síntesis, un electrolito acuoso (HNO<sub>3</sub> 10 mM) y un cátodo de acero inoxidable.

El método de síntesis se optimizó mediante un control grueso de la variable voltaje, fijándola en 3 rangos (450-550 V, 600-700 V y 750-850 V), y un control preciso de la variable diámetro de ánodo: se ensayaron diámetros de 0,25; 0,5; 1 y 1,5 mm. Se observaron diferencias en el proceso y en los productos obtenidos. En los materiales sintetizados se constató la coexistencia de los polimorfos de TiO<sub>2</sub> rutilo y anatasa con otros óxidos inferiores de titanio Ti<sub>n</sub>O<sub>2n-1</sub>, como pentóxido de titanio β-Ti<sub>5</sub>O<sub>9</sub>, óxido de Ti(III) Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y Ti<sub>6</sub>O<sub>11</sub>; siendo el rutilo la fase cristalográfica obtenida en mayor proporción.

Se presentarán y discutirán los resultados de la caracterización estructural y óptica mediante difracción de rayos X de polvo, espectroscopia Raman, espectroscopia ultravioleta-visible de reflectancia difusa, y determinación de área BET; analizando la influencia de las variables estudiadas en la síntesis.

Asimismo, se expondrán resultados preliminares de ensayos fotocatalíticos para la degradación en medio acuoso de metolacolor, contaminante que interesa a nivel nacional.

[1] Panomsuwan G., Watthanaphanit A., Ishizaki T., Saito N. Journal of Phys. Chem. Chem. Phys., 17 (2015) 13794-13799.

[2] Olivera Rohrer M., De León A., Fernández Werner L., González G., Faccio R., Bussi J. Desarrollo de síntesis de TiO<sub>2</sub> "negro" mediante plasma de agua para aplicaciones con energía solar, Séptimo Encuentro Nacional de Química, Torre de las Telecomunicaciones, Montevideo, Uruguay, 2021.

[3] Sengupta Susanta K., Prakash O. S. Journal of Electroanal. Chem., 369 (1994) 113-120.

## Aplicação de Grafeno em Fotoeletrodos de ZnS crescidos em ZnO

Thiago K. Pedra<sup>\*a</sup>, Cristian D. Fernandes<sup>a</sup>, Cristiane R. Ratmann<sup>a</sup>, Mateus Ferrer<sup>a</sup>, Pedro L. G. Jardim<sup>a</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>, Mario L. Moreira<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão, 96160-000, Rio Grande do Sul, Brasil*

\* thiagoopedraa@outlook.com

A busca por uma forma de energia renovável está presente e vem sendo discutida amplamente em nossa sociedade, isso devido aos menores impactos ambientais que são causadas pelas mesmas em relação as outras fontes de energia [1]. Sendo assim, conseguimos visualizar um aumento no uso de energias renováveis no Brasil, com destaque para a energia solar, visto que o desenvolvimento de novas tecnologias para células fotovoltaicas está em crescimento, ocasionando, a diminuição nos custos para a utilização da mesma [2]. Uma das possibilidades é o uso do grafeno em células fotovoltaicas, o grafeno é um nano material feito de átomos de carbonos que estão organizados em uma estrutura feita de hexágonos e sua flexibilidade estrutural é refletida em suas propriedades eletrônicas, físicas e químicas, por conta disso, o material vem sendo utilizado em diversos estudos para aplicação fotovoltaica [3][4]. Além disso, o composto core-shell ZnO/ZnS também é muito promissor para aplicações fotovoltaicas, visto que o ZnO e o ZnS possuem boas propriedades térmicas, óticas e químicas, além do ZnO apresentar uma eficiente mobilidade de elétrons [5]. O estudo tem como objetivo a inserção do grafeno no composto core-shell ZnO/ZnS de diferentes maneiras. Na primeira delas, o grafeno terá a forma de óxido (OG) e será aplicado durante o processo de síntese do composto ZnO/ZnS, na segunda será utilizado óxido de grafeno reduzido (RGO) e irá ser aplicado apenas após o processo de síntese do composto, em uma proporção em massa. Para realizar a produção das células solares, inicialmente irão ser sintetizados os compostos ZnO/ZnS através do método hidrotérmico assistido por micro-ondas, onde para o ZnO serão utilizados acetato de zinco dihidratado e hidróxido de sódio. Além disso, como precursor do enxofre será utilizada a tiocetamida, visto que apresentou os melhores resultados em estudos prévios realizados pelo grupo CCAF. Após esse processo, o grafeno irá ser adicionado conforme comentado anteriormente com amostras com óxido de grafeno (OG) e outras com óxido de grafeno reduzido (RGO). Para finalizar, serão constituídas as células solares sensibilizadas por corante, onde o foto-eletrodo será formado por um filme do composto sintetizado, e o contra-eletrodo será de platina. Como as amostras com o grafeno ainda estão em processo de sintetização, não foram realizadas caracterizações como Difração de Raios-X para verificar a fase cristalina, Microscopia Eletrônica de Varredura para avaliar a distribuição e tamanho dos cristais, além de medidas fotovoltaicas para obter a eficiência de conversão de energia solar em energia elétrica, entretanto, são esperados resultados superiores aos observados na literatura para a aplicação fotovoltaica do composto ZnO/ZnS sem o grafeno no sistema. Desse modo, o grafeno demonstra ser viável para a realização desse estudo, onde podemos influenciar positivamente os resultados, principalmente, na eficiência de conversão de energia solar em energia elétrica.

- [1] T.B. Johansson et al, *Renew. Energy*, 1 (2006) 33.
- [2] A. Ferreira et al, *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 81 (2018) 181-191.
- [3] X. Huang et al, *Chem. Soc. Rev.*, 41 (2012) 666-686.
- [4] A. H. Castro Neto et al, *Rev. Mod. Phys.*, 81 (2009) 109-162.
- [5] C. D. Fernandes et al, *New J. Chem.*, 44 (2020) 20600-20609.

## Eletrodos para bateria a base de biomassa (casca da bergamota) - economia circular e tecnologia aliada a segurança ambiental

Maicon Nolasco Pedrotti<sup>a</sup>, Neftali Lenin Villarreal Carreño<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Grupo Novonano – Universidade Federal de Pelotas, Andar Térreo - Campus Porto Rua Gomes Carneiro, 01 – Centro Pelotas - RS, Brasil - 96010-610  
maiconpedrotti@gmail.com

O aumento da demanda por energia elétrica no mundo tem sido um desafio. Para manter a estabilidade elétrica, fontes de energia que se originam de combustíveis fósseis se fazem presente, tendo como consequência, um elevado esgotamento desse tipo de fonte e a poluição do meio ambiente. Entre os sistemas aptos para a contribuição da matriz elétrica, baterias recarregáveis possuem autonomia de transmissibilidade de eletricidade para as cargas. Pesquisas atuais sobre as baterias com técnicas de armazenamento de energia eletroquímica (os eletrólitos aquosos com alta condutividade iônica e reagentes benignos ao meio ambiente) têm atraído para aplicações as baterias. A biomassa, dentro do conceito da economia circular, com estruturas de carbono ativo, se destaca como reagente qualificado de baixo custo e eficaz para as aplicações nos eletrodos das baterias. Ainda assim, o carvão como elemento único para aplicações na eletroquímica, não é o suficiente. Portanto, neste trabalho, o objetivo é ativar o carvão com o óxido de manganês pois o mesmo possui vários estados de valência e múltiplos cristais. Além disso, técnicas de síntese e eletrodeposição para obter os eletrodos serão documentadas. Associado a isso, combinações do eletrólito e separador iônico com os eletrodos para potenciais superiores a 1 V. A equipe de pesquisa possui capacidade no segmento de atuar nas transformações do carbono, tornando-o um material competitivo para elevar o seu potencial de energia. Metodologias efetivas na seção de armazenamento de energia têm sido buscadas com forte dedicação, para que a tecnologia atenda as energias renováveis e facilite o cotidiano das pessoas com eficiência energética aliada e conjugada com as células das baterias.

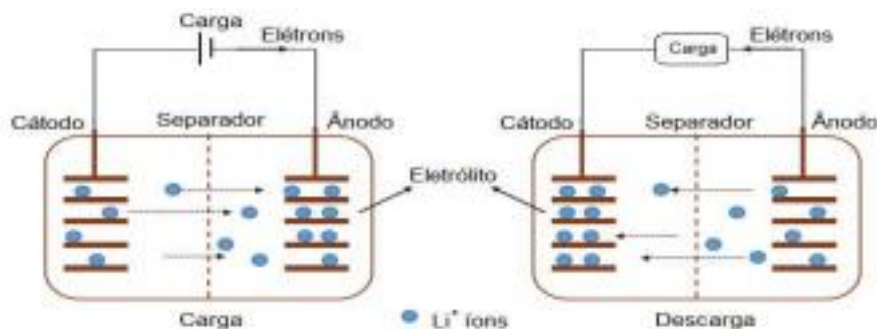


Figura 1: Mecanismo de carga e descarga em uma bateria típica de lítio. Fonte: adaptado de (YI et al., 2017).

[1] YI, Chan Pei; MAJID, Siti Rohana. The Electrochemical Performance of Deposited Manganese Oxide-Based Film as Electrode Material for Electrochemical Capacitor Application. Semiconductors - Growth and Characterization. Italy: IntechOpen, 2017, p. 186.

[2] YOKOKURA, Takashi J.; RODRIGUEZ, Jassiel R. Rodriguez; POL, Vilas G. Waste Biomass-Derived Carbon Anode for Enhanced Lithium Storage. ACS PUBLICATIONS: ACS Omega, v. 5, 31, p. 19715 – 19720, 2020.

## Efecto de la cantidad de PMMA y la amplitud de ultrasonido en la preparación de nanopartículas poliméricas

Camila Pérez<sup>a</sup>, Ivana Aguiar<sup>a</sup>, María Eugenia Perez<sup>b</sup> Mauricio Rodríguez<sup>a, c</sup>

<sup>a</sup> *Área Radioquímica, Facultad de Química, Gral Flores 2124, Montevideo*

<sup>b</sup> *DDT, CURE, Ruta 9 y Ruta 15, Rocha*

<sup>c</sup> *PDU Ciencias Físicas y sus Aplicaciones, CURE, Ruta 9 y Ruta 15, Rocha*

\* E-mail: [camila241099@icloud.com](mailto:camila241099@icloud.com)

Los polímeros mecanocrómicos son una familia emergente de materiales, que poseen la capacidad de alterar sus características de absorción y/o fluorescencia ante la aplicación de una fuerza mecánica (C. Weder, 2021). Estos mecanismos permiten crear polímeros con capacidad de auto-reporte frente al inicio de un daño, de forma de indicar defectos o la aplicación de estrés excesivo con una señal óptica claramente perceptible. Estos materiales pueden revelar daño mecánico, desgaste o envejecimiento, y pueden indicar daño mecánico inminente de los componentes estructurales a través de signos visuales de advertencia (Calvino, 2018). Una alternativa versátil y simple para lograr respuestas mecanocrómicas en materiales poliméricos es mediante micro o nanocápsulas que contengan un sistema de colorante que se libere y se active química o físicamente cuando la cápsula se daña.

Para ello estudiamos la síntesis de nanocápsulas poliméricas de polimetilmetacrilato (PMMA) conteniendo lactona cristal violeta (CVL del inglés) como sustancia indicadora del cambio (colorante). La técnica empleada fue la de emulsificación y se estudió la influencia de la cantidad de polímero PMMA y de la amplitud de ultrasonido en el tamaño y espesor de la cápsula. Se trabajó partiendo de 100, 200 y 300 mg de PMMA y con amplitudes de 30 y 40 %.

Se determinó el tamaño hidrodinámico por dispersión dinámica de luz (DLS) y por microscopía electrónica de transmisión (TEM). Los tamaños promedio de las nanocápsulas obtenidos mediante DLS fueron de entre 786 y 355 nm mientras que, por microscopía electrónica de transmisión, los resultados estuvieron en el rango de los 46 a 907 nm.

[1] T.T. Carvalho, P.B. Tavares, Mater. Lett., 62 (2008) 3984–3986.

[2] B.D Cullity, S.R. Stock, Elements of X-Ray Diffraction, 3ra ed., Prentice-Hall, Nueva Jersey, 2001.



## Modelado computacional para la evaluación de nanoestructuras 2D de ZnO como potenciales ánodos para baterías de ion-litio

Fernando Pignanelli \*<sup>a</sup>, Mariano Romero<sup>a</sup>, Ricardo Faccio<sup>a</sup>, Álvaro W. Mombrú<sup>a</sup>

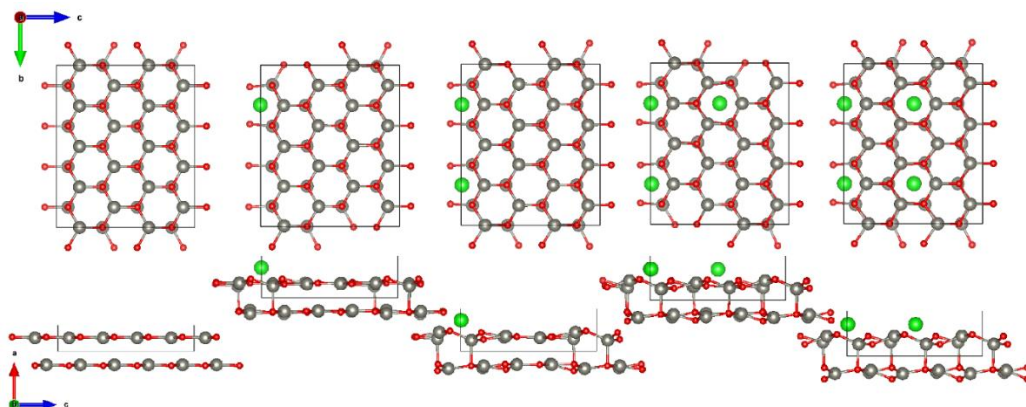
<sup>a</sup> Área Física, DETEMA, Facultad de Química - Udelar, Av. Gral. Flores 2124, 11800 Montevideo, Uruguay.

\* fpignanelli@fq.edu.uy

El grafito ha sido un material ampliamente utilizado como ánodo en baterías, principalmente del tipo ion-litio. Sin embargo, su baja capacidad teórica limita su aplicación en el almacenamiento de altas densidades de energía. Por otro lado, el litio metálico o el sodio son propensos a la oxidación durante el montaje del sistema, lo que representa un peligro y un problema para el rendimiento electroquímico. Por lo tanto, es pertinente el desarrollo de ánodos alternativos de alto rendimiento para baterías de ion-litio.

El óxido de zinc (ZnO) se ha considerado un material efectivo debido a varias características interesantes, como alta capacidad teórica, facilidad de síntesis, bajo impacto ambiental y costo moderado [1]. Además de sus muchas ventajas, adolece de dos problemas principales: la baja conductividad eléctrica y la expansión de volumen durante la carga y descarga electroquímica. Para superar estos problemas, la comunidad científica se ha esforzado mucho en diferentes enfoques, como la nano-estructuración (que ayuda a reducir el estrés causado por el cambio volumétrico) y la formación de compósitos con materiales que mejoran la conductividad eléctrica, como otros óxidos metálicos, derivados carbonosos, polímeros, etc. [2]

Con el fin de lograr una comprensión integral de la estructura y propiedades de estos materiales, así como su potencial aplicación como ánodo para baterías de ion-litio, en este trabajo presentamos el modelado de tres nanoestructuras bidimensionales de ZnO, utilizando métodos computacionales *ab initio* (Teoría funcional de la densidad). En particular, es interesante modelar los procesos de litiación que ocurren en la superficie de las nanoestructuras de ZnO propuestas durante el funcionamiento de la batería, con el objetivo de llevar a cabo una comparación sistemática del rendimiento.



[1] Bhatt, M. D., & Lee, J. Y. (2019). High capacity conversion anodes in Li-ion batteries: A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(21), 10852-10905.

[2] Bui, V. K. H., Pham, T. N., Hur, J., & Lee, Y. C. (2021). Review of ZnO Binary and Ternary Composite Anodes for Lithium-Ion Batteries. *Nanomaterials*, 11(8), 2001.

## Análise da Transmitância de Filmes Finos Depositados Sob Diferentes Condições para Camada de Bloqueio

Tatiane M. Rocha \*<sup>a</sup>, Luciano T. Gularte<sup>a</sup>, Mário L. Moreira<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas – UFPel – Campus Porto, R. Gomes Carneiro, 1 - Porto, Pelotas - RS, 96010-610

<sup>b</sup> Universidade Federal de Pelotas – UFPel – Campus Capão, Rua dos Ipês - Capão do Leão, RS, 96050-500

\* tatianemanke@hotmail.com

O aumento progressivo na demanda por energia tem estimulado pesquisadores de todo o mundo em busca do desenvolvimento de tecnologias para fontes de energia sustentáveis. Dentre as alternativas disponíveis, a energia solar se destaca pela quantidade vasta e suficiente de energia limpa e renovável na forma de irradiação [1,2,3]. Na busca por alternativas potenciais para células solares viu-se que o Niobato de Potássio ( $\text{KNbO}_3$ ) é um material pouco explorado no contexto de dispositivos de conversão de energia solar, porém sua síntese em forma de nanoestruturas e sua natureza semicondutora, juntamente com a abundância do elemento Nióbio no Brasil, o torna atraente para potencial aplicação, visando um dispositivo brasileiro de baixo custo [4,5].

Nanopartículas de  $\text{KNbO}_3$  foram sintetizadas utilizando o método de hidrotermalização assistida por micro-ondas com temperatura de 200 °C. Os compostos obtidos possuem estrutura ortorrômbica e bandgap indireto com valor 3,0 eV [6]. Para a deposição do filme de  $\text{KNbO}_3$ , foi preparado 3 concentrações diferentes, em 50 ml de etanol, e assim feita a deposição com dip-coating com variação de cinco velocidades de retirada, resultando em doze filmes finos. Após foi feita a secagem e cura a 200 °C por 5 min. Até o momento obtivemos resultados parciais. A transmitância destas doze amostras, foram observadas que a velocidade média de retirada obteve o melhor resultado de transmissão na faixa do infravermelho, sendo superior a do vidro. Com estes resultados podemos utilizar estes filmes como uma camada de bloqueio (blocking layer) onde a mesma deve evitar passagem de corrente direta pelo sistema de uma célula solar.

[1] MAUAD, Frederico Fábio; FERREIRA, L. C.; TRINDADE, Tatiana Costa Guimarães. Energia renovável no Brasil. Análise das principais fontes energéticas renováveis brasileiras, p. 740-1, 2017.

[2] GULARTE, Luciano T. et al. In situ microwave-assisted deposition of CoS counter electrode for dye-sensitized solar cells. Solar Energy, v. 198, p. 658-664, 2020.

[3] HEWAT, A. W. Cubic-tetragonal-orthorhombic-rhombohedral ferroelectric transitions in perovskite potassium niobate: neutron powder profile refinement of the structures. Journal of Physics C: Solid State Physics, v. 6, n. 16, p. 2559, 1973.

[4] LILGE, Tatiane Strelow. Sistema de Titanato de Bário ( $\text{BaTiO}_3$ ) decorado com Fluoreto de Cálcio ( $\text{CaF}_2$ ) não dopado e dopado com Eu aplicáveis em dispositivos solares. Tese (Doutorado em Física) Universidade Federal de Sergipe – UFS, São Cristóvão - SE, 2021.

[5] MOREIRA, M. L. et al. Hydrothermal microwave: a new route to obtain photoluminescent crystalline  $\text{BaTiO}_3$  nanoparticles. Chemistry of Materials, v. 20, n. 16, p. 5381-5387, 2008.

[6] CUCATTI, S.; GULARTE, L. T.; FERNANDES, C. D.; CARVALHO, R. D.; FERRER, M. M.; JARDIM, P. L. G.; RATMANN, C. R.; CAVA, S. S.; MOREIRA, M.L. . Potassium niobate as a photoelectrode for dye-sensitive solar cell.

## Um Avanço Recente na Camada de Transporte de Elétrons com o Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> em PSCs

Inaiara L. Rodrigues<sup>\*a</sup>, Cátia L. Ücker<sup>a</sup>, Pedro L. G Jardim<sup>a</sup>, Mário L. Moreira<sup>a</sup>, Sergio S. Cava<sup>a</sup>,

<sup>a</sup> *Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão, 96160-000, Rio Grande do Sul, Brasil*  
\*inaiaraleite68@gmail.com

As tecnologias fotovoltaicas de terceira geração estão ganhando importância, especialmente, as células solares de perovskita (PSCs, sigla em inglês), que se destacam por aumentarem significativamente a eficiência na conversão de energia (PCE, sigla em inglês). A eficiência das PSCs melhorou 20% em apenas alguns anos, e tem potencial de ultrapassar a eficiência com custos de produção econômicos [1, 2]. As PSCs são destacadas devido às suas propriedades excepcionais, como grande coeficiente de absorção e alta mobilidade de portadores de carga. No entanto, ainda há desafios, como a estabilidade, ligada à morfologia, porosidade e estabilidade química da camada de transporte de elétrons (ETL, sigla em inglês)[1,2]. A estrutura típica de uma PSCs é composta por FTO, (ITO)/ETL/perovskita/HTL/eléctrodo de metal [2]. A busca por um ETL eficiente e com mobilidade de elétrons é atualmente uma temática relevante na pesquisa de PSCs [1, 2]. Embora o TiO<sub>2</sub> seja um material comum como ETL, outras abordagens estão sendo avaliadas para melhorar o desempenho e a estabilidade das PSCs, como a dopagem com outros óxidos metálicos ou a substituição por Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> [1, 3]. As melhorias nas propriedades da ETL, como superfície modificada, dopagem e hibridação com moléculas conjugadas, podem aumentar a eficiência dessas células [1]. O Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> e outros óxidos metálicos têm potencial para serem eficazes como ETL em PSCs [3]. Este trabalho fornece uma sucinta visão dos estudos recentes que abordam a utilização do Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> como ETL em PSCs. De acordo com os resultados da pesquisa, a investigação do uso do Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> como uma nova opção de ETL para PSCs é promissora devido aos avanços já alcançados na PCE, como apresentado em [3] com uma PCE de 18,59%, em [4] com 17,2%, em [5] com 14,2% e, finalmente, em [6] com 20,22%. A utilização do Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> como ETL em PSC é importante devido ao aumento significativo na eficiência de conversão de energia em trabalhos recentes [3,5,6]. A alta reprodutibilidade destacada em [4] é uma demanda importante para PSCs. O método de síntese e deposição influencia significativamente na preparação do filme fino de Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, conseqüentemente, na determinação da PCE das PSCs [3]. As características únicas do Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> como alta transmissão, eficiente transporte de cargas, posição adequada da banda de condução [5], estabilidade à luz UV e histerese insignificante [6], fazem dele uma opção promissora como ETL para reduzir a recombinação de portadores entre a perovskita e o eletrodo. Logo, torna-se promissor o estudo dessa temática no desenvolvimento de uma ETL mais eficiente com Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> para PSCs.

- [1] VALADI, K. et al. Metal oxide electron transport materials for perovskite solar cells: a review. *Environmental Chemistry Letters*, v. 19, p. 1610–3361, 2021.
- [2] NOH, M. F. M. et al. The architecture of the electron transport layer for a perovskite solar cell. *J. Mater. Chem. C, The Royal Society of Chemistry*, v. 6, p. 682–712, 2018.
- [3] FENG, J. et al. E-beam evaporated nb2o5 as an effective electron transport layer for large flexible perovskite solar cells. *Nano Energy*, v. 36, p. 1–8, 2017.
- [4] LING, X. et al. Room-temperature processed nb2o5 as the electron-transporting layer for efficient planar perovskite solar cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, v. 9, n. 27, p. 23181–23188, 2017.
- [5] GU, B. et al. Efficient planar perovskite solar cells based on low-cost spin-coated ultrathin nb2o5 films. *Solar Energy*, v. 166, p. 187–194, 2018.
- [6] WANG, Z. et al. Solution processed nb2o5 electrodes for high efficient ultraviolet light stable planar perovskite solar cells. *ACS Sustainable Chemistry Engineering*, v. 7, p. 187–194, 2019.

## Efecto del surfactante y del pH en la preparación de cápsulas de PMMA

Yamila Scagni<sup>a</sup>, Ivana Aguiar<sup>a</sup>, María Eugenia Perez<sup>b</sup>, Mauricio Rodríguez<sup>a, c</sup>

<sup>a</sup>Área Radioquímica, Facultad de Química, Gral Flores 2124, Montevideo

<sup>b</sup>DDT, CURE, Ruta 9 y Ruta 15, Rocha

<sup>c</sup>PDU Ciencias Físicas y sus Aplicaciones, CURE, Ruta 9 y Ruta 15, Rocha

\* E-mail: scagniyamila@gmail.com

Los vitrímeros son una clase de materiales poliméricos con buena resistencia química y mecánica que, a su vez, pueden ser reusados y reciclados debido a la introducción de enlaces covalentes dinámicos en la red polimérica. Recientemente se ha planteado la capacidad de auto-reparación y reciclabilidad como algunas de sus características deseables. En este contexto surge el desarrollo de micro o nanocápsulas poliméricas que pueden ser mezcladas con el vitrímero. Las cápsulas contienen un sistema de colorante que se libera y se activa química o físicamente cuando la cápsula se daña, pudiendo así señalar el momento y lugar en que un vitrímero es dañado [Patrick, 2016].

En el presente trabajo empleamos la técnica de emulsificación para obtener nanocápsulas de polimetilmetracrilato (PMMA) con lactona cristal violeta (CVL del inglés) como colorante. Empleando un diseño experimental evaluamos la influencia de la cantidad de surfactante y el pH en el tamaño de las cápsulas. Para ello se trabajó con cuatro niveles de surfactante 1, 5, 10 y 20 % y con y sin ajuste de pH. Se determinó el tamaño hidrodinámico por dispersión dinámica de luz (DLS) y por microscopía electrónica de transmisión (TEM) también se evaluó la morfología y formación de la cápsula.

[1] T.T. Carvalho, P.B. Tavares, Mater. Lett., 62 (2008) 3984–3986.

[2] B.D Cullity, S.R. Stock, Elements of X-Ray Diffraction, 3ra ed., Prentice-Hall, Nueva Jersey, 2001.

## Agregado de fibra de carbono en placas negativas de baterías de plomo-ácido: efecto en las propiedades fisicoquímicas y electroquímicas de la placa y su relación con la performance eléctrica de la batería

Mariana Silva\* <sup>a</sup>, Andrés Cuña<sup>b</sup>, Jossano Saldanha Marcuzzo<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Departamento de metales, Instituto de Ensayo de Materiales, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay

<sup>b</sup> Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay

<sup>c</sup> JMHP Consultoria en Materiales Ltda, Brasil

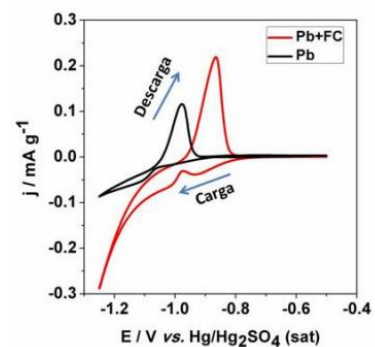
\* msilva@fing.edu.uy

Diferentes trabajos científicos de los últimos años han reportado que el agregado de materiales de carbono a la placa negativa de la batería plomo ácido (BPA), puede tener diferentes efectos beneficiosos en la performance del dispositivo [1-2]. En este trabajo, se estudió el efecto del agregado de una fibra de carbono activada (FC) en el comportamiento electroquímico de la placa negativa de una BPA y en el comportamiento de la BPA ensamblada.

La FC se preparó a partir de fibras textiles de poliacrilonitrilo, mediante el tratamiento térmico de carbonización y activación detallado por Marcuzzo y col. [3]. Se prepararon placas negativas de BPA utilizando el método industrial convencional en la preparación de este tipo de placas, obteniendo placas negativas sin adición de fibra (Pb) y con adición de 0.1% en peso de fibra (Pb+FC). Se compararon las propiedades fisicoquímicas, electroquímicas y eléctricas.

Para evaluar el desempeño electroquímico de los materiales preparados se utilizó una celda de tres electrodos con una solución de ácido sulfúrico 5 mol L<sup>-1</sup> como electrolito. Los voltamogramas obtenidos para ambos materiales se muestran en la Figura 1. Comparando el área bajo el pico en el barrido anódico (descarga) y la corriente máxima del pico, parámetros directamente relacionados con la capacidad de acumulación de carga del material, se puede observar que la muestra de Pb + FC presentó mayor área y densidad de corriente en el pico, indicando que este material tiene mayor capacidad de carga y eficiencia de almacenamiento de energía [4].

Las pruebas eléctricas de las baterías que contienen FC mostraron un aumento en el número de ciclos de carga, hasta un 47.8 % más, en comparación con la batería que no contiene FC. Esta mejora estaría relacionada con una mejora de las propiedades electroquímicas (mayor capacidad de carga y menor resistencia) y texturales (mayor superficie específica) provocadas por la adición de la fibra.



- [1] P. Mosley, D. Rand, A. Davison, B. Monahoy. Understanding the functions of carbon in the negative active-mass of the lead–acid battery: A review of progress. *Journal of Energy Storage* 19, 272–290, 2018.
- [2] Y. Jiang, H. Zhu, C. Yu, X. Cao, L. Cheng, R. Li, S. Yang, C. Dai. Effects of Carbon Additives on the HRPSoc Performance of Lead Carbon Batteries and Their Low Temperature Performance. *Journal of Electrochem. Sci.*, 12, 10882 – 10893. 2017.
- [3] J. Marcuzzo, C. Otani, H. Polidoro, S. Otani. Influence of thermal treatment on porosity formation on carbon fiber from textile PAN, *Mater. Res.* 16, 137-144, 2013.
- [4] H. Wang, Z. Liu, Q. Liang, H. Zhong, C. Han, S. Zhang, Z. Chen. A facile method for preparation of doped-N carbon material based on sisal and application for lead-carbon battery. *J. of Cleaner Production*, 197, 332-338, 2018.

## **A07 – Dispositivos electrónicos**

---

**A07 – P01 al P08 – Jueves**

## Propiedades Electrónicas de L-triptófano adsorbido sobre MXenos de fórmula $Ti_3C_2T_x$ ( $T_x=O$ )

Luciana Fernández-Werner<sup>a</sup>, Martín Esteves<sup>a</sup>, Lucía Amy<sup>b</sup>, Martina Kieninger<sup>c</sup>, Oscar Ventura<sup>c</sup> & Ricardo Faccio<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Área Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup>Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

<sup>c</sup>Computational Chemistry and Biology Group, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

lucianaf@fq.edu.uy

Los MXenos (MXenes) son sistemas bidimensionales (2D) emergentes, compuestos por carburos, nitruros y carbonitruros de metales de transición; que presentan propiedades estructurales, eléctricas y electroquímicas muy interesantes [1]. Son esencialmente sistemas estructurales bidimensionales, que presentan muy buena estabilidad químico-estructural, alta conductividad eléctrica, gran superficie activa y una enorme posibilidad de funcionalizar su superficie para ser altamente hidrofílicos [2]. Dentro de los posibles MXenos el más común es el  $Ti_3C_2T_x$  (siendo T los grupos terminales superficiales: -O, -OH y -F), el cual recientemente ha sido estudiado por sus interesantes propiedades de “upconversion fluorescence” para la detección de L-triptófano [3]. En este trabajo se estudiará la adsorción de L-triptófano sobre una superficie de  $Ti_3C_2T_x$  ( $T_x=O$ ), utilizando el código VASP[4, 5]. Se reportarán las geometrías más estables, y a partir de ellas se determinarán las propiedades electrónicas más relevantes: densidad electrónica de estados y función dieléctrica; comparando con las propiedades de la molécula aislada calculadas a nivel TDDFT. Estos modelos serán a su vez utilizados para la respuesta fotodinámica, ante la presencia de un campo eléctrico variable, utilizando el código DFTB+[6]. Se discutirán los cambios en la densidad de carga entre la superficie y el L-triptófano y se determinarán las propiedades ópticas mediante métodos dependientes del tiempo (real time density functional theory).

### Referencias

- [1] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum, *Advanced Materials*, 23 (2011) 4248-4253.
- [2] S. Bai, M. Yang, J. Jiang, X. He, J. Zou, Z. Xiong, G. Liao, S. Liu, *npj 2D Materials and Applications*, 5 (2021) 78.
- [3] F. Wang, H. Wang, X. Cui, Y. Liu, *Sensors & Diagnostics*, 1 (2022) 1080-1087.
- [4] G. Kresse, J. Furthmüller, *Physical Review B*, 54 (1996) 11169-11186.
- [5] G. Kresse, J. Furthmüller, *Computational Materials Science*, 6 (1996) 15-50.
- [6] B. Hourahine, et al, *The Journal of Chemical Physics*, 152 (2020) 124101.

## **Estudo das propriedades elétricas e mecânicas de sistemas PEAD/PANI para aplicação na eletrônica orgânica**

Alana Fernandes Golin<sup>a</sup>, Rodrigo Fernando Bianchi<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu - Paraná, Brasil*

<sup>b</sup> *Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto - Minas Gerais, Brasil*

\*alana.golin@unila.edu.br

Na área de ciência e engenharia de materiais, a técnica de medida em corrente alternada (ac) tem se tornado cada vez mais usual para caracterização elétrica de sistemas poliméricos desenvolvidos para aplicação em dispositivos eletrônicos orgânicos. Essa técnica possibilita investigar os mecanismos de condução dos portadores de carga, identificar efeitos de interface-volume, definir a melhor frequência de operação e, conseqüentemente, qualificar o potencial de aplicação de novos sistemas na eletrônica orgânica [1]. Nesse contexto, o objetivo principal deste trabalho foi realizar o estudo teórico-experimental das propriedades eletromecânicas do sistema PEAD/PANI para investigar sua possível aplicação em dispositivos eletrônicos flexíveis. Os sistemas PEAD/PANI foram preparados via polimerização *in situ* da polianilina (PANI) em substrato flexível de polietileno de alta densidade (PEAD) e caracterizados por espectroscopia de impedância (1 Hz a 1 MHz) durante ensaios mecânicos de tração. Com os resultados obtidos simultaneamente foi possível observar que o sistema polimérico possui alta resistência mecânica, com tensão de ruptura em torno de 140 MPa, e tem sua impedância elétrica aumentada cerca de 5 M $\Omega$  devido à deformação mecânica. Por meio das curvas de impedância real  $Z'$  e imaginária  $Z''$ , a frequência de 100 Hz foi definida como a melhor frequência de operação para dispositivos à base de PEAD/PANI. A partir dos modelos de Cole-Cole e de Barreiras de Energia Livres e Aleatória (RFEB) [2] foi observado que o sistema possui uma estrutura desordenada do tipo simétrica e que o aumento da impedância elétrica ocorre em razão da ampliação de 8 nm na distância média  $r$  entre as barreiras de energia do material durante a tração, o que reduz a frequência de salto dos portadores de carga e a mobilidade elétrica. Por fim, com o desenvolvimento deste trabalho, além de contribuir para compreensão dos mecanismos de condução no sistema PEAD/PANI, foi constatado que as propriedades elétricas e mecânicas desse novo sistema o proporcionam um leque de aplicações no campo da eletrônica orgânica, como em dispositivos vestíveis e sensores de deformação, que necessitam de flexibilidade e alta resistência mecânica.

[1] BARSOUKOV, E.; MACDONALD, J. R. Impedance spectroscopy: theory, experiment and applications. Ed. John Wiley & Sons, 2018.

[2] DYRE, J. C. The random free-energy barrier model for ac conduction in disordered solids. *Journal of Applied Physics*, v. 64, n. 5, p. 2456-2468, 1988.



## Sensores a base de LIG modificados para determinação de metais pesados em recursos hídricos

Amanda A. Gomes\*<sup>a</sup>, Juliano V. Sinotti<sup>b</sup>, Bruno V. Lopes<sup>b</sup>, Raphael D. C. Balboni<sup>b</sup>, Lucas M. Gonçalves<sup>a</sup>, Victoria P. Monks<sup>b</sup>, Neftali L. V. Carreno<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Pelotas, Bacharelado em Engenharia de Materiais

<sup>b</sup>Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

\* amandagomes0205@gmail.com

No Brasil, a qualidade da água em corpos hídricos segue recomendações baseadas no CONAMA Nº 357/05, que define a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento. Dependendo da quantidade de substâncias nocivas e tóxicas, pode ocorrer uma alteração significativa nas características físicas, químicas e biológicas do corpo hídrico, inviabilizando sua utilização. O problema mais comum das águas no Brasil é o crescimento elevado na concentração de metais pesados lançados na água que pode afetar múltiplos usos de ecossistemas aquáticos [1].

Os sensores eletroquímicos são ferramentas analíticas capazes de coletar informações e dados, apresentando maior sensibilidade e precisão na resposta à presença do analito estudado [2]. Baseado no crescimento elevado de metais pesados nos recursos hídricos, o presente trabalho busca o desenvolvimento de sistemas sensores baseados em estruturas carbono (grafeno por indução a laser (LIG)) modificado, alterando suas propriedades e tornando-os responsivos à um determinado estímulo elétrico a partir de reações eletroquímicas. Para tal, a estrutura e morfologia do grafeno será funcionalizada com nanopartículas de óxidos ou metálicas, hospedados em matrizes 3D de polímeros condutores.

[1] ZHANG, J. et al. Efficient Water-Splitting Electrodes Based on Laser-Induced Graphene. ACS Applied Materials and Interfaces, 9 (2017) 26840– 26847.

[2] Anuar, N.S. et al. RSC Adv., 10 (2020) 17336-17344.

## Sensores eletroquímicos baseados em nanoestruturas de carbono para monitoramento contínuo de glicose em animais

Victoria P. Monks <sup>\*a</sup>, Bruno V. Lopes<sup>a</sup>, Alaor V. Filho<sup>a</sup>, Amanda A. Gomes<sup>b</sup>, Lucas M. Gonçalves<sup>b</sup>, Neftalí L. V. Carreño<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

<sup>b</sup> Universidade Federal de Pelotas, Bacharelado em Engenharia de Materiais

\* vi.monks@gmail.com

A desordem pancreática endócrina mais diagnosticada em clínica de pequenos animais é a Diabetes Mellitus (DM), que consiste em uma síndrome caracterizada por hiperglicemia, ocasionada pela falta de insulina ou incapacidade de executar seus efeitos metabólicos.

Os métodos de monitoramento de glicose podem ser realizados através da concentração sérica de frutossamina, hemoglobina glicada, glicose urinária, glicose capilar ou mensuração contínua via intersticial [1]. A monitoração seriada de glicemia pelo método tradicional através da glicose capilar muitas vezes se torna um problema, seja no ambiente familiar ou hospitalar, pois estressa o animal devido às múltiplas punções venosas necessárias, dificultando a adesão ao esquema de monitoramento proposto pelo Médico Veterinário [2].

Este projeto tem o intuito de desenvolver dispositivos sensores eletroquímicos, que são caracterizados por responderem, através de modificações em suas propriedades, a um determinado estímulo, neste caso, a presença de glicose e sua quantificação. Sensores eletroquímicos podem ser definidos como dispositivos capazes de fornecer informações qualitativas e/ou quantitativas sobre um determinado analito através de sua interação com um elemento de reconhecimento ligado a um transdutor, com a função de converter os sinais de reconhecimento em sinais mensuráveis e proporcionais à concentração do analito.

Neste projeto, as plataformas contendo os eletrodos dos sensores são fabricadas por meio da técnica de gravação direta a laser (GDL), que se destaca pela capacidade de sintetizar grafeno de alta qualidade e alta área superficial, gerando uma classe de material denominada grafeno induzido por laser (laser induced graphene – LIG). As análises e os testes de sensibilidade/seletividade foram realizados em amostras contendo soluções de glicose com diferentes concentrações e interferentes, com respostas proporcionais à quantidade de analito presente nas amostras em questão.

O dispositivo proposto visa apresentar uma alternativa mais barata e acessível, por ser produzido por meio de processos mais simples e com menor custo, baseado em materiais carbonáceos em substituição aos metais atualmente utilizados. Outra vantagem será a produção de um sensor com menores dimensões, tornando mais confortável para os pacientes do que o dispositivo atualmente disponível no mercado brasileiro, contribuindo para a otimização no diagnóstico e controle dos níveis de glicose, fornecendo resultados que auxiliem na tomada de decisão e que gerem impacto na área da saúde animal.

[1] JERICÓ, M. M.; ANDRADE NETO, J. P.; KOGIKA, M. M.; Tratado de medicina interna de cães e gatos. Rio de Janeiro: Roca, 7045 p, 2015.

[2] NELSON, R. W.; COUTO, C. G. Medicina interna de pequenos animais. 5. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 4442 p., 2015.

## Propiedades magnéticas de tetrafenil-porfirinas (TPP) metálicas adsorbidas selectivamente sobre sustratos metálicos y aislantes.

Benjamín Montenegro, Ricardo Faccio & Álvaro W. Mombrú.

*Área Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

La espintrónica y la electrónica molecular han captado en forma importante la atención de la comunidad científica en los últimos tiempos. Esta área del conocimiento no sólo se dedica a explicar lo interesante de las nuevas propiedades que ofrece la nanoescala, sino que ofrece un potencial importante ante la cota que está alcanzando la electrónica convencional. La nanotecnología y la posibilidad de preparar y manipular sistemas a nivel molecular dan lugar a la obtención de nuevas propiedades y aplicaciones. Algunos ejemplos son los avances que se han logrado en temas tan importantes y variados como catálisis, energía, electrónica, etc [1]. Un tipo de sistema que ha tomado relevancia en los últimos tiempos es el ensamble híbrido de interfaces molécula/superficie. Las moléculas de estructura basadas en porfirinas ofrecen una impresionante variedad de comportamientos: químico, físico y biológico. La variabilidad de los metales y sustituyentes con las que pueden sintetizarse las porfirinas les dan a estas moléculas una gran cantidad de aplicaciones: en celdas solares de sensibilización espectral (DSSC) como colorantes, en espintrónica y como switches moleculares [1-3], entre otras [1-3]. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos mediante cálculos DFT para la adsorción de tetrafenilporfirinas metálicas de composición (NiTPP) sobre superficies de Cu<sub>2</sub>N/Cu(110). En los cuales se observa gran variabilidad de propiedades electrónicas: densidad de estados, densidad de carga; y las propiedades magnéticas dependiendo del sitio de absorción de la molécula. Lo cual podría utilizarse tanto en electrónica molecular como en espintrónica.

[1] Auwärter, W., et al., Nature chemistry, 2015. 7(2): p. 105.

[2] Zoldan, V.C., R. Faccio, and A.A. Pasa, Scientific Reports, 2015. 5: p. 8350.

[3] B.F. Baggio, W. Chen, B. Montenegro, M.A. Tumelero, R. Faccio, V.C. Zoldan, C. Gao, A.A. Pasa, The Journal of Physical Chemistry C, 125 (2021) 9695-9702.

## Uso de materiales de alta permitividad eléctrica para diseño de antenas

José Gómez<sup>\*a</sup>, Leonardo Barboni<sup>a</sup>, Benigno Rodríguez<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Telecomunicaciones, Instituto de Ingeniería Eléctrica, Fing-UDELAR, Julio Herrera y Reissig 565, 11300, Montevideo, Uruguay*

\*jgomez@fing.edu.uy

La ciencia de los materiales es transversal a todas las áreas de la ingeniería, y el desarrollo de antenas para sistemas inalámbricos no es la excepción. En un sistema inalámbrico, la antena suele ser el componente que tiene mayor margen de mejora. Por eso la investigación en el desarrollo de antenas de desempeño mejorado es un área de investigación muy activa. Existen numerosas alternativas para mejorar el desempeño de una antena: agregado de ranuras, usando múltiples elementos (arreglos de antenas), usando materiales no clásicos -tanto como conductores como dieléctricos- [1-4], mediante el uso de metamateriales, etc. En este trabajo se considera el uso de agua destilada, como un dieléctrico de alta permitividad eléctrica relativa (PER), como forma de aumentar el tamaño eléctrico de la antena sin aumentar su tamaño físico, o lo que es lo mismo, para lograr antenas de menor tamaño, capaces de trabajar a frecuencias más bajas. El agua destilada (DW por sus siglas en inglés) tiene una PER,  $PER_{DW} \sim 80$ , lo que permite una reducción de tamaño (RT) para una antena embebida en DW de aproximadamente  $RT =$ . No solo permite una RT del orden de 9 veces, si no que aparecen múltiples bandas de resonancia donde puede funcionar esta antena embebida en DW. En este trabajo se presentan varios resultados que muestran el potencial de esta técnica para reducir el tamaño de las antenas. La reducción del tamaño de las antenas es algo generalmente muy apreciado, ya sea para disminuir el tamaño final del dispositivo, para disminuir la resistencia al viento cuando se las instala en una torre, e incluso para disminuir la cantidad de material necesaria para su fabricación.

[1] Junwei Lu, D. Ireland and R. Schlub, "Dielectric embedded ESPAR (DE-ESPAR) antenna array for wireless communications," in IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 53, no. 8, pp. 2437-2443, Aug. 2005, doi: 10.1109/TAP.2005.852517.

[2] J. Sun and K. -M. Luk, "A Wideband Low Cost and Optically Transparent Water Patch Antenna With Omnidirectional Conical Beam Radiation Patterns," in IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 65, no. 9, pp. 4478-4485, Sept. 2017, doi: 10.1109/TAP.2017.2730250.

[3] Zou, M., Shen, Z., Pan, J.: Frequency-reconfigurable Water Antenna of Circular Polarization. Applied Physics Letters 108(1) (2016). <https://doi.org/10.1063/1.4939455>

[4] M. Wang and Q. -X. Chu, "High-Efficiency and Wideband Coaxial Dual-Tube Hybrid Monopole Water Antenna," in IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters, vol. 17, no. 5, pp. 799-802, May 2018, doi: 10.1109/LAWP.2018.2816679.

## Modified LIG Sensor for Dopamine Detection

Lucas M. Gonçalves\*<sup>a</sup>, Bruno V. Lopes<sup>b</sup>, Raphael C. Balboni<sup>b</sup>, Amanda A. Gomes<sup>a</sup>,  
Victoria P. Monks<sup>b</sup>, Neftalí L. V. Carreño<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal de Pelotas, Bacharelado em Engenharia de Materiais*

<sup>b</sup> *Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-graduação em Ciência e Engenharia de Materiais*

\* lucasmingon@gmail.com

The use of non-invasive medical techniques has become increasingly frequent. Thus, the research and development of an electrochemical sensor for the detection of dopamine (DA) in human tears becomes relevant, since according to the World Health Organization, the variation in AD is directly linked to the presence of several diseases such as Parkinson's, schizophrenia disorders, Alzheimer's and depression. (Costanza, 2020) Electrochemical sensors are analytical tools capable of collecting information and data, presenting greater sensitivity and precision in the response to the presence of the analyte. (Anuar, 2020) The present work applies the LIG (Laser Induced Graphene) technique to create electrochemical sensors. (LIN et al., 2014) For a comparative study, working electrodes were produced presenting an LIG sensor without modification (pure), LIG with platinum in the variations of 300, 600 and 1200 seconds of electrodeposition, LIG with tin, and LIG with tin and graphene oxide. To analyze their efficiency, the technique of cyclic voltammetry was applied in PBS (pH7), and in the absence and presence of 0.5 mM dopamine. The modifications in the sensors were not efficient, since the best result was the sensor without modification. For future analysis, they will be applied to synthetic tear samples and later to real samples.

[1] Costanza, A. et al., Bentham Science, 19 (2020) 257-263.

[2] Anuar, N.S. et al. RSC Adv., 10 (2020) 17336-17344.

[3] Lin, J. et al. Nature Communications, (2014) 1–8.

## Estudio de respuesta eléctrica en nanocompuestos de PANI-grafeno

Tatiana Gregorio<sup>a\*</sup>, Dominique Mombrú<sup>a</sup>, Mariano Romero<sup>a</sup>, Ricardo Faccio<sup>a</sup>, Álvaro W. Mombrú<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República

\*tgregorio@fq.edu.uy

Hoy en día existe gran interés en la preparación y caracterización de dispositivos basados en polímeros conductores para la foto respuesta [1-3] y aplicaciones para la conversión de energía [4]. La polianilina (PANI) es uno de los polímeros conductores más estudiados debido a su fácil preparación, bajo costo y alta conductividad [5]. Últimamente se está generando gran cantidad de reportes basado en la preparación y propiedades de transporte eléctrico de PANI formando parte de compósitos que incluyen pequeñas adiciones de otros materiales como grafeno [2,3]. El mismo ha llamado la atención durante los últimos años debido a su extraordinariamente alta conductividad eléctrica y térmica [6-8].

En este trabajo se mostrará la síntesis de nanocompuestos de polianilina (PANI) y grafeno. La obtención de grafeno se realizó a partir de la exfoliación de grafito haciendo uso de una mezcladora de alto cizallamiento Silverson, utilizando como surfactante lauril sulfato de sodio en solución acuosa. Posteriormente se procedió a la centrifugación a distintas revoluciones, para fraccionar la suspensión y seleccionar el de tamaño adecuado en función de su peso. De esta manera se obtuvieron flakes de grafeno de tamaño homogéneo. Luego se lo incorporó a la polianilina buscando que los compósitos tengan porcentajes en peso de: 0.1, 1.0, y 10% de grafeno en PANI. Los compositos obtenidos se caracterizaron mediante espectroscopia infrarroja (FT-IR), difracción de rayos X de polvo (DRX) y microscopía Raman confocal. La respuesta eléctrica de los nanocompuestos fue estudiada mediante espectroscopía de impedancia, en la cual se observan cambios importantes con el agregado de las diferentes fracciones de grafeno. Se muestra de esta forma, que el agregado permite el ajuste de la respuesta eléctrica en nanocompuestos de PANI.

- [1] Sreejith, S. *et al.* *Nanoscale* 2016, 8, 8547–8552.
- [2] Mombrú, D. *et al.* *Phys. Chem. C* 2016, 120, 25117–25123.
- [3] Mombrú D. *et al.* *Appl. Phys.* 2017, 121, 045109.
- [4] Abdulrazzaq, O. *et al.* *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7, 27667–27675.
- [5] Bhadra, S. *et al.* *Prog. Polym. Sci.* 2009, 34, 783–810.
- [6] Novoselov, K. *et al.* *Science* 2004, 306, 666–669.
- [7] Geim, A. *et al.* *Nat. Mater.* 2007, 6, 183–191.
- [8] Balandin, A. *et al.* *Nano Lett.* 2008, 8, 902–907.

## **A08 – Otros materiales de interés tecnológico**

---

**A08 – P01 al P16 – Jueves**

**A08 – P17 al P32 - Viernes**

## **Síntese de alginato a partir de macroalga**

Érica C. Campos <sup>\*</sup>, Luiza R. Santana <sup>²</sup>, Neftalí L. V. Carreño <sup>³</sup>

<sup>¹</sup>Universidade Federal de Pelotas, Rua Gomes Carneiro 1, sala B134 - Porto, Pelotas - RS, 96010-610

\* ericadacostacampos@gmail.com

Macroalgas são fontes naturais de carboidratos com altos teores de polissacarídeos que podem variar até 76%, dependendo da espécie, estação do ano e seções das macroalgas. A alga marrom é uma biomassa renovável devido à sua disponibilidade abundante em todo o mundo, e o processo de bioprodução baseado em algas marinhas, é considerado biodegradável, biocompatível e ecológico. Neste sentido, no presente trabalho optou-se por fazer a extração do alginato através da alga *Durvillaea Antarctica*, colhida na costa chilena. Sua análise de difração de raios - X foi realizada para investigar as características microestruturais do alginato de sódio derivado da alga *Durvillaea Antarctica*. O difratograma do alginato comercial apresentou uma estrutura bastante amorfa e o difratograma do alginato extraído das algas, mostrou-se semelhante ao padrão do alginato comercial.

Agradeço aos professores Claudio Martin Pereira de Pereira (Universidade Federal de Pelotas - UFPel) e Andrés Mansilla (Cape Horn International Center - CHIC) pela disponibilização da matéria-prima estudada.



## Evaluación del potencial uso de SiO<sub>2</sub>-Quitosano en liberación controlada

Mauricio Cardoso\*<sup>a</sup>, Martín Torres <sup>a</sup>, Eloísa Arrarte <sup>a</sup>, Jorge Castiglioni <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Físicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar. General Flores 2124, Montevideo, Uruguay

\* mcardoso@fq.edu.uy

La liberación controlada (LC) se define como la transferencia regulada de un compuesto activo desde un reservorio modificado hacia un objetivo específico o una región, manteniendo la concentración de los compuestos activos en el nivel adecuado por periodos de tiempo prolongados [1]. Esta herramienta se basa en el desarrollo y evaluación de materiales porosos, solos o en combinaciones híbridas, para el suministro modulado de compuestos de interés en diferentes áreas como la biomédica o la agrícola [2]. Así, se han reportado sistemas compuestos de polímeros, naturales o sintéticos, sílice (SiO<sub>2</sub>), arcillas, metales, carbones, entre otros materiales [2].

La obtención de SiO<sub>2</sub> biogénica a partir de cáscara de arroz es un ejemplo claro de la revalorización de residuos para la generación de materiales con gran aplicabilidad en varias áreas [3]. Este material se ha estudiado ampliamente en diferentes campos, debido a sus favorables características físicoquímicas, tales como volumen de poro y área superficial [4]. Uno de los polímeros más ampliamente estudiados es el quitosano (Q), el cual es biodegradable, biocompatible, no tóxico y capaz de formar diferentes estructuras que le permiten su combinación con otros materiales en sistemas híbridos [5]. Existen reportes del estudio del material híbrido SiO<sub>2</sub> sintética-Q para la aplicación de diferentes compuestos de interés, pero no existen reportes del uso en combinación de SiO<sub>2</sub> biogénica y quitosano, por lo que el objetivo de este trabajo se enmarca en la síntesis y caracterización de un sistema híbrido SiO<sub>2</sub>-quitosano, así como su evaluación de la adsorción isotérmica de azul de metileno como molécula modelo con el fin de evaluar su potencial uso en LC.

La SiO<sub>2</sub> biogénica se sintetizó a partir de cáscara de arroz de la especie INIA-*Tacuari*, y para mejorar las características físicoquímicas del material final se llevaron a cabo diferentes síntesis que emplearon polietilenglicol. Por su parte, para generar el material híbrido SiO<sub>2</sub>-Q se utilizó tripolifisfato de sodio (TPP) para entrecruzar las cadenas de quitosano. Finalmente, se sintetizaron partículas de Q utilizando TPP. Los materiales sintetizados fueron caracterizados mediante SEM, DLS, Fisisorción en N<sub>2</sub>, TGA, DRX y FT-IR, y se evaluó la adsorción de azul de metileno a 25 °C sobre los diferentes materiales, empleando la espectrofotometría UV-visible como técnica de seguimiento, con el fin de comparar el aporte de cada material en el compuesto híbrido SiO<sub>2</sub>-Q.

Los resultados obtenidos muestran que el uso de polietilenglicol para la síntesis de SiO<sub>2</sub> biogénica, mejora sus características texturales (área superficial y tamaño de poro). Además, se obtuvo partículas de Q en el orden nanométrico. Por su parte, el material híbrido SiO<sub>2</sub>-Q sintetizado mostró diferencias abruptas en la adsorción de azul de metileno cuando es comparado con la adsorción sobre SiO<sub>2</sub> y Q por separado. Esto permite proyectar al material híbrido como potencial candidato en el uso de liberación controlada, y tal investigación será desarrollada en posteriores trabajos.

[1] T. Guha, G. Gopal, R. Kundu, and A. Mukherjee. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 68:3691–3702, 3 2020

[2] A. Singh, N. Dhiman, A. K. Kar, D. Singh, M. P. Purohit, D. Ghosh, and S. Patnaik. *Journal of Hazardous Materials*, 385, 3 2020

[3] C. D. L. Santos, M. Torres, P. Portugau, A. Lambreche, R. Faccio, and J. Castiglioni. XXVII CONGRESO IBEROAMERICANO DE CATALISIS, 2020.

[3] B. D. Mattos, O. J. Rojas, and W. L. Magalhães. *Journal of Cleaner Production*, 142:4206–4213, 1 2017a

[4] P. H. C. de Lima, A. A. Tavares, S. M. de Lima Silva, M. R. de Moura, F. A. Aouada, and R. Grillo. *Applied Clay Science*, 226, 9 2022

## Síntesis y caracterización de biochar de bambú para remoción de microcistina-LR

Camila Hernández <sup>a</sup>, Yanaína Castro \* <sup>a</sup>, Alejo Silvarrey<sup>a</sup>, Diana Miguez<sup>b</sup>, Mirian E. Casco <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Ingeniería, Universidad Católica del Uruguay, Av. 8 de octubre 2738, Montevideo, Uruguay*

<sup>b</sup> *Fundación Latitud, Laboratorio Tecnológico del Uruguay (LATU), Av. Italia 6201, Montevideo, Uruguay*

\* yanainacastroc@gmail.com

El aporte de nutrientes provenientes de las prácticas agrícolas y de la descarga de aguas residuales en cuerpos de agua, junto con determinadas condiciones climáticas, son los principales factores que llevan a la proliferación de cianobacterias. Se han identificado más de 70 variantes de cianotoxinas, de las cuales la microcistina-LR (MC-LR) es la más conocida. Las cianotoxinas son liberadas en aguas superficiales y muchas son consideradas tóxicas para el ser humano y para el ecosistema acuático [1]. Los tratamientos convencionales de aguas residuales o agua para consumo humano suelen utilizar carbón activado en grandes cantidades para remover estos contaminantes, sin embargo, es un material que debe importarse en Uruguay. Por lo tanto, es de gran interés crear un material nacional más económico y sustentable que garantice el abastecimiento de agua potable. En este trabajo se desarrolló y caracterizó un biochar nacional a partir de residuo de bambú (sumistrado por la empresa uruguaya Bambú del Este), para la remoción de MC-LR. El mejor biochar se obtuvo carbonizando la materia prima en un horno tubular a 600°C durante 30 minutos bajo atmósfera inerte de nitrógeno. El material resultante está compuesto por un 85% de carbono, 1.7% de hidrógeno, 0.8 % de nitrógeno, 7.2% de oxígeno y 5.2% de cenizas. La porosimetría de mercurio mostró una macroporosidad de 55.8%. La superficie específica BET obtenida mediante isoterma de adsorción de nitrógeno a 77K es de 64m<sup>2</sup>/g. El porcentaje de remoción de la MC-LR en solución acuosa en lecho fijo resultó en un 92%, mientras que el porcentaje de remoción en columna de una muestra real contaminada con MC-LR fue de 99.5%. Estos excelentes resultados, se deben mayoritariamente a la atracción electrostática entre la molécula de la MC-LR y los grupos funcionales del biochar. El biochar, de carácter básico (punto de carga cero 8.7), se encuentra cargado positivamente al pH del efluente contaminado (cerca de 7), mientras que la molécula de MC-LR se encuentra en su forma aniónica bajo las mismas condiciones [2]. En consecuencia, la adsorción por atracción electrostática se ve maximizada.

Este trabajo, es una prueba más de que Uruguay dispone de biomasa y conocimiento necesarios para el desarrollo de materiales sostenibles aplicables a procesos de remediación de agua contaminada.

[1] L. De León, J.S. Yunes. Environmen. Toxicol. 16 (2001) 110-112.

[2] C. Rivasseau, S. Martins, M.C. Hennion. J. Chromatogr. A., 799 (1998) 155–169.

## Extraction of cellulose nanomaterials from eucalyptus pulp by enzyme-mediated mechanical treatments

Florencia Cebreiros\*<sup>a</sup>, Gustavo A. Sánchez<sup>b</sup>, Claudia Lareo<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Bioingeniería, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, 11300 Montevideo, Uruguay*

<sup>b</sup> *Departamento Ingeniería de Materiales y Minas, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, 1130 Montevideo, Uruguay*

\* fcebreiros@fing.edu.uy

Cellulose nanomaterials (CNM) are nano-sized particles which can be obtained from any type of cellulosic feedstock such as hardwoods, softwoods, grasses, algae, and even from agricultural wastes (e.g. bagasse, straw, husk) [1]. The production of these CNM has gained increasing attention over the past few decades due to their potential applications such as reinforcement in nanocomposites, packaging materials, and biomedical materials. Also, CNM have great potential to replace petroleum-based materials in technological applications due to their attractive properties such as non-toxic nature, biocompatibility, biodegradability, and mechanical properties. Two different kinds of CNM can be obtained from cellulosic feedstocks based on the size, morphology, and extraction method: cellulose nanocrystals (CNC) and cellulose nanofibers (CNF). Typically, CNF have long, entangled, and flexible fibrils with diameters and lengths in the range of 1-100 nm and 500-2000 nm, respectively. CNF are commonly isolated from cellulosic materials by mechanical treatment such as refining, homogenization, ultrasonication, grinding, microfluidization, ball milling, and extrusion [2]. Even though all these treatments operate under high shear force that causes the cleavage of cellulose fibers, its high energy consumption limits its implementation. To overcome this, the introduction of a chemical or biological pretreatment is proposed to facilitate the mechanical treatment of cellulose fibers and bring down the energy consumption [3]. In this work, the extraction of CNF from bleached eucalyptus Kraft pulp using two different mechanical treatments (ultrasonication and ball milling) is presented. One main advantage of using eucalyptus pulp compared to other cellulosic materials is the shorter fibers, which could facilitate disintegration and reduce energy input during mechanical treatment. An enzymatic pretreatment was performed prior to mechanical treatment to break the cellulose polymer into smaller length polymers by catalyzing the hydrolysis of amorphous (or less organized) parts of cellulose fibers employing biocatalysts (cellulase and xylanase enzymes). CNF extraction yields were determined to evaluate and compare the effectiveness of the two different mechanical treatments on cellulose disintegration and nanofibrillation. The quality of the extracted CNF was evaluated by size, morphology, surface, crystallinity, and thermal analysis. Finally, nanocellulosic films of CNF were prepared by casting.

[1] F. Cebreiros, G. Sánchez, M. D. Ferrari, C. Lareo. Integrating the coproduction of cellulose nanofibers and biobutanol from eucalyptus pulp using an environmentally friendly process. *Ind. Crops Prod.*, 188 (2022) 115732.

[2] M. Michelin, D. G. Gomes, A. Romaní, M. D. L. Polizeli, J. A. Teixeira. Nanocellulose production: exploring the enzymatic route and residues of pulp and paper industry. *Molecules*, 25 (2020) 3411.

[3] F. Cebreiros, S. Seiler, S. S. Dalli, C. Lareo, J. Saddler. Enhancing cellulose nanofibrillation of eucalyptus Kraft pulp by combining enzymatic and mechanical pretreatments. *Cellulose*, 28 (2020) 189–206.

## Produção de carvão ativado magnético a partir de biomassa de caroço de pêssego e avaliação da sua capacidade de adsorção

Leandro L. Silveira <sup>a</sup>, Fernando M. Machado \* <sup>a</sup>, Júlia A. Guido<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Centro de Desenvolvimento Tecnológico Universidade Federal de Pelotas, R. Gomes Carneiro, 01, Pelotas – RS

<sup>b</sup> Centro de Engenharias Universidade Federal de Pelotas, R. Benjamin Constant, 989, Pelotas – RS

\*juliaguidodesign@gmail.com

Atualmente, os maiores desafios no que diz respeito à qualidade de água é o controle sobre o que é descartado no sistema aquático e o seu tratamento adequado [1]. O descarte inapropriado de corantes sintéticos em corpos hídricos é uma das causas de poluição de água potável. Dentre os corantes amplamente utilizados, destaca-se a Eritrosina B, que está presente no nosso dia-a-dia na composição de doces, balas, fármacos, e produtos de higiene pessoal [2]. Uma rota eficiente, econômica e de fácil escalonamento para tratamento – purificação de águas é o processo de adsorção. Nesse, o contaminante é transportado da fase aquosa para a superfície do adsorvente [3]. No Brasil, a produção de pêssego tem expandido consideravelmente, sendo o Rio Grande do Sul o maior produtor nacional. Porém, o processamento desse fruto gera elevado volume de resíduos que, geralmente, são descartados de forma inapropriada no meio ambiente, causando impacto ambiental [4]. Uma alternativa sustentável para superar esse problema é a utilização desse resíduo como precursor para a produção de carvão ativado. Uma das formas de produção desse material é aquela que utiliza sais, como cloreto de ferro, que além de ativar o material, o deixa com características magnéticas. Com esse intuito, o presente trabalho demonstra a produção de carvão ativado magnético a partir da biomassa de pêssego, e avalia a eficiência desse material na remoção do corante Eritrosina B de soluções aquosas [5]. Na preparação do carvão ativado de pêssego, foi utilizada uma proporção de 1:0,5 de biomassa de pêssego e cloreto de ferro. Essa mistura passou pelos processos de carbonização (em um forno assistido por micro-ondas), refluxo e lavagem. Para avaliar a eficiência, foram feitos ensaios de adsorção em batelada, utilizando concentrações de 50 a 200 mg.L<sup>-1</sup>. Ensaios cinéticos foram conduzidos no intervalo de 1 a 300 minutos. No ensaio de adsorção, foi possível remover até 98% em uma concentração de 130 mg.L<sup>-1</sup>. No ensaio de cinética realizado em concentração de 70 mg.L<sup>-1</sup>, foi possível observar que após 10 minutos o carvão adsorveu 95% do contaminante e, após 2 horas, foi verificada uma adsorção de 99,9 % do corante. A partir desse estudo, conclui-se que a rota de produção do carvão ativado magnético a partir de uma biomassa de caroço de pêssego e cloreto de ferro em forno micro, foi bem-sucedida. Ainda, devido as características magnéticas do material preparado foi possível realizar a sua separação da solução com o auxílio de um ímã, o que tornou o processo mais rápido e econômico.

[1] C.F. Azevedo, et. Al, Chemical Engineering Journal, Volume 454, Part 2, 2023, 140102, ISSN 1385-8947

[2] H. Marzoque,. Dissertação (Mestrado em Ciencia e Tecnologia de Alimentos). Programa de Pós-Graduação Stricto Senso em Ciência e tecnologia de alimentos, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais. 2019.

[3] F.M. Machado, et. Al .The journal of Physical Chemistry,. v.120, p.18296-18297, 2016

[4] IBGE - INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. Produção Agrícola anual. 2022

[5] D.R. Lima, et. Al. Journal of Environmental Chemical Engineering, Volume 9, Issue 5,2021, 105865, ISSN 2213-3437.

## Estudio de aleaciones de Heusler de Ni-Mn-Cu por primeros principios

Alejandro Alés <sup>a</sup>, Fernando Lanzini \* <sup>a, b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina

<sup>b</sup> Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina

\* flanzini@ifimat.exa.unicen.edu.ar

Las aleaciones de Heusler han despertado atención desde su descubrimiento debido a propiedades magnéticas inusuales para los constituyentes puros [1]. Más aún, muchas de ellas presentan propiedades de memoria de forma que las vuelven atractivas desde el punto de vista tecnológico, debido a efectos elasto- y magnetocalóricos asociados a las transiciones martensíticas y magnéticas [2]. Comúnmente, este tipo de aleación posee una composición  $X_2YZ$  con X e Y elementos de transición y Z elemento principal, lo cual induce a la formación de hibridaciones en los orbitales p-d que confieren una ductilidad característica a la aleación, pero muchas veces no muy útiles por efectos de fatiga o fragilidad [3]. Por otro lado, en un nuevo impulso trabajos recientes estudian aleaciones donde todos los elementos son metales de transición, donde la hibridación de los orbitales es del tipo d-d; esto es, además de la posibilidad de que todos los elementos pueden presentar momentos magnéticos localizados, se ha reportado una mejora en las propiedades magnetoestructurales y las vuelve firmes candidatas para usos ingenieriles. En esta tendencia, las aleaciones con base Ni-Mn están siendo actualmente estudiadas [5,6].

En este trabajo se estudian las aleaciones de Heusler compuestas por Ni-Mn combinados con Cu por medio de la teoría del funcional de la densidad. Se han determinado las estructuras de equilibrio para las diferentes composiciones químicas analizadas, el tipo de magnetización de equilibrio, las constantes elásticas y, por medio de la deformación de Bain, se han hallado posibles transformaciones martensíticas. Además, se realiza un estudio de la densidad electrónica para distintas deformaciones de Bain y se caracteriza la distorsión de Jahn-Teller observada en la separación de los picos de densidad cuando se comprime o expande la estructura cristalina.

[1] Felser, C., & Hirohata, A. (2015). *Heusler alloys* (p. 10). Berlin: Springer.

[2] Graf, T., Parkin, S. S., & Felser, C. (2010). Heusler compounds—A material class with exceptional properties. *IEEE Transactions on Magnetics*, 47(2), 367-373.

[3] de Paula, V. G., & Reis, M. S. (2021). All-d-Metal Full Heusler Alloys: A Novel Class of Functional Materials. *Chemistry of Materials*, 33(14), 5483-5495.

[4] Zeng, Q., Shen, J., Zhang, H., Chen, J., Ding, B., Xi, X., ... & Wu, G. (2019). Electronic behaviors during martensitic transformations in all-d-metal Heusler alloys. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 31(42), 425401.

[5] Wei, Z. Y., Liu, E. K., Chen, J. H., Li, Y., Liu, G. D., Luo, H. Z., ... & Wu, G. H. (2015). Realization of multifunctional shape-memory ferromagnets in all-d-metal Heusler phases. *Applied Physics Letters*, 107(2), 022406.

[6] Bachaga, T., Zhang, J., Khitouni, M., & Sunol, J. J. (2019). NiMn-based Heusler magnetic shape memory alloys: A review. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 103(5), 2761-2772.

## Anodização colorida por corante natural em material de alumínio usado para aplicações tecnológicas

Raisi N. L. Baldez<sup>a</sup>, Thomás S. Ferreira<sup>b</sup>, Fabrício K. da Silva<sup>c</sup>, Richard Pereira<sup>d</sup>, Carlomagno Gonzalez<sup>e</sup>, Luiz F. Rodrigues Junior<sup>f</sup>

<sup>a,b,c,f</sup> Engenharia de Materiais - Universidade Franciscana, Santa Maria, Rio Grande do Sul, Brasil.

<sup>f</sup> Engenharia Biomédica - Universidade Franciscana, Santa Maria, Rio Grande do Sul, Brasil.

<sup>a,d,e</sup> Laboratorio de Ciencia e Ingeniería de Materiales - Universidad Tecnológica ITR Norte, Rivera, Uruguay.

\*raisi.lenz@utec.edu.uy

Devido a baixa densidade, alta resistência térmica e baixo valor econômico, o alumínio e suas ligas têm sido amplamente usados para atender uma gama de aplicações de interesse tecnológico, na indústria automotiva e aeroespacial [1]. O processo de anodização do alumínio é utilizado com diversas finalidades, entre as quais o aumento da resistência à corrosão e pré-tratamento para aplicação de revestimentos orgânicos. Além disso, o processo de anodização no material pode produzir porosidade na superfície do metal. Os poros formados podem ser usados para armazenar e reter o agente corante para tornar o material mais durável [2,3]. Este trabalho tem como objetivo observar as características de coloração na superfície do alumínio influenciadas por diversos parâmetros do processo de anodização, incluindo concentração eletrolítica de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 15% a uma temperatura de 5 °C, densidade de corrente elétrica de 3 A/dm<sup>2</sup> e uso de corantes orgânicos e de fontes renováveis, para tornar a peça mais atrativa. Foram utilizados corantes obtidos através de cenoura, café e repolho roxo. As amostras ficaram submersas no banho de corante por 20 minutos e após isso, foram seladas em água fervente por mais 40 minutos. As propriedades eletroquímicas da camada de óxido e influência dos parâmetros de anodização e selagem sobre estas, serão analisadas utilizando microdurômetro. O potenciostato será usado para avaliar o comportamento de corrosão a partir do potencial de circuito aberto e tensão, corrente de corrosão das amostras anodizadas e não anodizadas.

[1] B.D Cullity, S.R. Stock, Elements of X-Ray Diffraction, 3ra ed., Prentice-Hall, Nueva Jersey, 2001.

Michaela Remešová et al. Applied Surface Science 513 (2020) 145780.

[2] Y. M. Zuláida, A. H. Ramadhanisa, T. Partuti. Materials Science and Engineering, 673 (2019) 012138.

[3] B.D Cullity, S.R. Stock, Elements of X-Ray Diffraction, 3ra ed., Prentice-Hall, Nueva Jersey, 2001. C. J. Donahue, J. A. Exline. J. Chem. Educ. 91 (2014), 711–715.

## Heteroestructura Van der Waals tri-yoduro de bismuto– grafeno, material 2D

Laura Fornaro <sup>a</sup>, C. Maidana \* <sup>a</sup>, H. Bentos Pereira <sup>a</sup>, A. Noguera <sup>a</sup>, A. Olivera <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Centro Universitario Regional Este, Ruta Nacional N°9 intersección Ruta N°15, Rocha, Uruguay.

\* cami.mds@gmail.com

En el presente trabajo se estudió la nucleación, post-nucleación y crecimiento cristalino de la heteroestructura 2D tri-yoduro de bismuto ( $\text{BiI}_3$ ) – grafeno, por el método de deposición física de vapor (PVD), con el fin de contribuir a la búsqueda de una teoría general de nucleación no clásica de cristales y de las primeras etapas del crecimiento cristalino aplicada al desarrollo de materiales 2D. El  $\text{BiI}_3$  es un semiconductor compuesto, perteneciente al grupo de los llamados “haluros de metales pesados”, conocidos por sus interesantes propiedades y aplicaciones, principalmente en los campos de Imagenología de radiaciones, y celdas solares. Estudios teóricos predicen que la heteroestructura  $\text{BiI}_3$ -grafeno presenta una interacción estable de Van der Waals entre el grafeno y el  $\text{BiI}_3$ , y mayor absorción para fotones de luz visible que el material bulk.

En este trabajo se crecieron heteroestructuras 2D tri-yoduro de bismuto ( $\text{BiI}_3$ ) – grafeno por PVD, utilizando un sistema diseñado para trabajar en condiciones de presión del orden de  $1\text{E}-08$  mBar, permitiendo además un control estricto de temperatura de fuente y de sustrato. Las deposiciones por PVD de  $\text{BiI}_3$  se realizaron sobre sustratos y sobre grillas de TEM, ambos con recubrimiento de grafeno, para su posterior caracterización por Difracción de Rayos X (XRD) y Microscopía Electrónica de Transmisión de Alta Resolución (HR-TEM), respectivamente. Se evaluó la influencia de diferentes parámetros experimentales, tales como: tiempo de deposición, temperaturas de fuente y sustrato, presión inicial, cantidad de  $\text{BiI}_3$  colocada a sublimar, entre otros. Se obtuvieron depósitos de entidades pre-núcleos, de menos de 10 nm, algunas amorfas, otras cristalinas, las cuales se mantienen presentes aún bajo el haz de TEM con transformaciones rápidas entre estructuras ordenadas y desordenadas. Estas entidades permitieron observar que la nucleación del  $\text{BiI}_3$  sobre grafeno no sigue la teoría clásica de nucleación. A su vez, se lograron observar mecanismos de crecimiento post-nucleación de  $\text{BiI}_3$  sobre el grafeno, “oriented attachment” y “amorphous addition”, ambos mecanismos no cumplen con la teoría clásica de crecimiento posterior de los núcleos y como resultado dan estructuras más grandes de 10-20 nm de tamaño, estables y cristalinas. De los resultados que surgen de la caracterización por HR-TEM, se observó que la nucleación se da en la fase romboédrica del  $\text{BiI}_3$ , y mayoritariamente con los planos cristalinos orientados en el eje c ( $0\ 0\ 1$ ). Estas características son semejantes con lo obtenido a partir de la caracterización por XRD, donde se obtuvo una coincidencia de posición e intensidad de picos con respecto a la base de datos utilizada que indica que la heteroestructura 2D tri-yoduro de bismuto ( $\text{BiI}_3$ ) – grafeno obtenida corresponde a la fase romboédrica del  $\text{BiI}_3$  y el pico de mayor intensidad demuestra la orientación ( $0\ 0\ 3$ ) como preponderante.

Los resultados de este trabajo pueden ser una valiosa contribución al desarrollo de una teoría general para la nucleación no clásica en varios sistemas, así como también aportar al campo de los materiales 2D y heteroestructuras de Van der Waals y sus aplicaciones.

## Elementos ópticos de origen natural: caracterización y modelado

Juan Pedro Martínez\*<sup>a</sup>, Pablo Fagúndez<sup>b</sup>, Paulo Valente<sup>a</sup>, Javier Pereyra<sup>a</sup>, Mariana Pereyra<sup>b</sup>,  
Gabriela Bentancur-Viglione<sup>c</sup>, Enrique Morelli<sup>c</sup>, Ricardo Marotti<sup>a</sup>, Enrique Dalchiele<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Ave Julio Herrera y Reissig 565,  
Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> Unidad de Bioquímica Analítica, Facultad de Ciencias, Iguá 4225, Montevideo, Uruguay.

<sup>c</sup> Sección Entomología, Facultad de Ciencias, Iguá 4225, Montevideo, Uruguay.

\* jmartinez@fing.edu.uy

Las ideas de Aristóteles, que era tan biólogo como filósofo, están repletas de fascinación e inspiración del mundo natural. En sus palabras: “la naturaleza no hace nada en vano”. Luego de 2500 años, varias áreas de investigación en ciencia de materiales tomaron nota y han buscado allí ideas para el diseño y la fabricación de materiales novedosos—resultando en la biomimética [1]. Las hojas de loto, por ejemplo, exhiben superhidrofobicidad debido a nanoestructuras jerárquicas [2]. Esto resulta en el “efecto loto”[3] y tiene posibles aplicaciones en ventanas autolimpiantes, pinturas y textiles [2]. Actualmente existe gran interés en comprender cómo los materiales naturales adquieren su coloración. En particular los “colores estructurales” permitirían reemplazar a los pigmentos—que son altamente contaminantes—con micro y nanoestructuras [4][5]. Recientemente se ha logrado replicar las nanoestructuras [5] y ha sido demostrado que su distribución casi-aleatoria en la mariposa *G.goto* son responsables de las propiedades antirreflectoras omnidireccionales y de gran ancho de banda en las partes transparentes del ala [4], [6].

En este trabajo estudiaremos las propiedades ópticas de dos especies autóctonas de Uruguay: *Episcada hymenaea*—mariposa translúcida común—y *Saturniidae Heliconisa pagenstecheri*, una polilla. Se medirá la reflectancia y transmitancia en el espectro visible para distintos ángulos de incidencia. Además, se utilizarán láseres de distintas longitudes de onda para caracterizar los efectos de las nanoestructuras en el estado de polarización de la luz midiendo los parámetros de Stokes. Se buscará también verificar la ley de Malus, ya que algunas de estas estructuras se comportan como polarizadores lineales [4]. Por último, se buscará la presencia de quiralidad, una característica usual en materiales biológicos. A partir de métodos basados en una matriz de transferencia, se modelará el conjunto a partir del cual se buscará obtener el espesor y el índice de refracción de ambas estructuras.

[1] B. Dean and B. Bhushan, Phil Transactions, vol. 368, no. 1929. Royal Society, pp. 4775–4806

[2] K. Koch, et.al Soft Matter, vol. 5, no. 7, pp. 1386–1393, 2009

[3] B. Bhushan et.al Phil. Transactions, Royal Society, vol. 367, no. 1894, pp. 1631–1672

[4] N. Dushkina and S. Erten, Available: <https://bioone.org/terms-of-use>

[5] S. Zobl, et.al Bioinspir Biomim, vol. 11, no. 1, Feb. 2016

[6] R. H. Siddique, G. Gomard, and H. Hölscher, Nat Commun, vol. 6, Apr. 2015.



## Visualization of the final stage of sintering in nanoceramics with atomic resolution

Tanna E. R. Fiuza<sup>a</sup>, Marlon M. da Silva<sup>a,b</sup>, Jefferson Bettini<sup>a</sup>, Edson R. Leite<sup>a,c\*</sup>

<sup>a</sup>Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano), CNPEM; 13083-970, Campinas, SP, Brazil

<sup>b</sup>Faculdade de Química, Centro de Ciências Exatas, Ambientais e de Tecnologias (CEATEC), Pontifícia Universidade Católica de Campinas (PUCCamp), 13086-900, Campinas, Brasil

<sup>c</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos; 13565-905, São Carlos, SP, Brazil

\*edson.leite@lnnano.cnpem.br

The deep understanding of the sintering mechanism is pivotal to optimize the production of denser ceramics. Although several models explain satisfactorily the sintering in micrometric scale, the extrapolation for nanostructured systems is not trivial. Aiming to provide additional information about the particularities of the sintering at the nanoscale, we performed in situ experiments using high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM). We studied the pore elimination process in a ZrO<sub>2</sub> thin film, and we identified a high anisotropic pore elimination. Interestingly, there is a redistribution of the atoms from the rough surface in the solid-gas surface, followed by the atom attachment in a faceted surface. Finally, we found evidence of the pore acting as a pin, reducing the GB mobility. These findings certainly can contribute to enhancing the kinetic models to describe the densification process of systems at nanoscale [1].

[1] T.E.R. Fiuza, M.M. da Silva, J. Bettini, E.R. Leite, T.T. Carvalho, P.B. Tavares, *Nano Lett.*, 22, (2022) 1978-1985.

Síntese a combustão para obtenção do pentóxido de vanádio (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)

Otávio B. Pacheco<sup>\*a</sup>, César O. Avellaneda<sup>a</sup>, Tiago M. Volkmer<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Engenharia de Materiais, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas –RS, Brasil

\*otaviopacheco2001@gmail.com

Os compostos de óxidos de vanádio possuem grande potencial de aplicação devido as suas propriedades físicas e químicas. Dentre eles, se destaca o pentóxido de vanádio (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>), o qual possui diversas aplicações como em sensores, catálise e aplicações eletrocromicas [1]. A síntese a combustão envolve a propagação de reações exotérmicas autossustentadas ao longo de um meio aquoso ou sol-gel. Este processo permite a síntese de uma variedade de materiais em nanoescala [2]. As propriedades dos produtos podem ser ajustadas alterando-se os parâmetros de combustão [3]. O objetivo desta pesquisa é realizar uma síntese por combustão para obter o V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Para isso, se dissolveu 8 mmol de metavanadato de amônio (NH<sub>4</sub>VO<sub>3</sub>) em 200 mL de uma solução 0,5M de ácido nítrico (HNO<sub>3</sub>) e adicionou 32 mmol de ureia, que serve de combustível, na reação. Após isso, aumentou-se a temperatura da chapa de aquecimento até a evaporação de boa parte da solução e, então colocou-se o béquer em uma mufla a 500°C para que a síntese ocorresse. Depois de 30 minutos, a mufla foi desligada e o material retirado. O material obtido foi caracterizado por difração de raios X visando identificar a fase cristalina formada. O gráfico da Figura 1, mostra o difratograma de Raios X da amostra sintetizada. Os picos encontrados demonstram que o material sintetizado corresponde à fase V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, ficha cristalográfica ICDD 041-1426. Usando-se a equação de Scherrer, verificou-se que o tamanho de cristalito obtido foi de 56,4 nm. Os resultados obtidos indicam que foi possível obter o V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> por síntese de combustão.

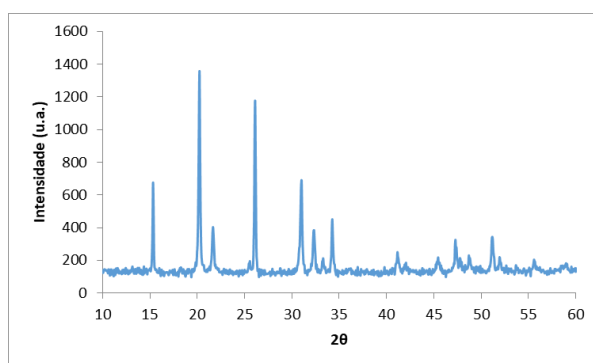


Figura 1. Difratoograma do pentóxido de vanádio sintetizado por combustão.

[1] AVANSI, Waldir. Síntese de Nanopartículas de Óxido de Vanádio obtidas pela decomposição do Peróxido. 2010. 151 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.

[2] Arvind Varma, Alexander S. Mukasyan, Alexander S. Rogachev, and Khachatur V. Manukyan *Chemical Reviews* **2016** 116 (23), 14493-14586.

[3] Haoyang Wu, Mingli Qin, Zhiqin Cao, Xiaoli Li, Baorui Jia, Pengqi Chen, Min Huang, Xuanhui Qu, Direct synthesis of vanadium oxide nanopowders by the combustion approach, *Chemical Physics Letters*, Volume 706, 2018, Pages 7-13.

## Obtenção de Nanoesferas de Sulfeto de Cobre através do Método Hidrotérmico assistido por Micro-ondas.

Vinicius Pereira Dias<sup>1</sup>, Cátia Liane Ücker<sup>2</sup>, Cristiane Wienke Raubach<sup>3</sup>

*Crescimento de Cristais Avançados e Fotônica (CCAF) – Universidade Federal de Pelotas (UFPEl)*  
viniciusdiassvp@gmail.com

O sulfeto de cobre (CuS) é um excelente semicondutor, apresenta um *band gap* de aproximadamente 2,5 eV e detém maior condutividade em temperaturas elevadas [1]. O CuS possui propriedades fotocatalíticas e de absorvância, podendo ser aplicado em células solares, filmes finos, catálise, sensores químicos, capacitores, materiais compósitos e fotocatalise [2-3]. O método hidrotérmico assistido por micro-ondas (HAM), é recomendado como rota de síntese porque possui um aquecimento acelerado, uniforme, simples e de curta duração até o ponto de cristalização da amostra [4]. O objetivo dessa pesquisa é a obtenção do CuS através do método HAM, caracterização do particulado obtido e a testagem da sua aplicação em fotocatalise. A síntese foi realizada utilizando 1 mol de nitrato de cobre ( $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ ) e uma certa quantidade molar de tiourea ( $\text{H}_2\text{NCSNH}_2$ ), solubilizados em 40 mL de água destilada, ficando sob agitação constante por 5 minutos a 50°C, para melhor solubilização. Posteriormente, a solução foi submetida ao método HAM na temperatura de 165°C por 1 hora. Obteve-se, como resultado de síntese, um particulado preto, que foi lavado em uma centrífuga (3600rpm) para ajuste de pH à neutralidade e seco em uma estufa a 100°C por 24 horas. Caracterizou-se a amostra pela Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), onde pôde-se observar a formação de nanoesferas (Figura 1). Outras caracterizações serão realizadas, como a UV-Vis, FTIR, DRX e Raman. Será testada, também, a sua aplicação em fotocatalise.

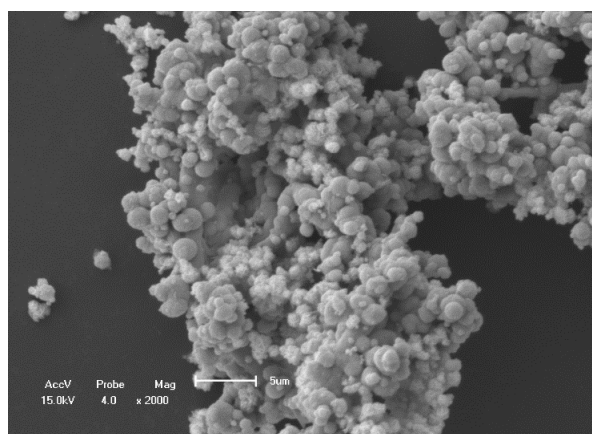


Figura 1 – MEV do CuS

- [1]NEMADE, K. R.; WAGHULEY, dan SA. Band gap engineering of CuS nanoparticles for artificial photosynthesis. **Materials Science in Semiconductor Processing**, v. 39, p. 781-785, 2015.
- [2]LI, Ye-Hua; WANG, Zheng. Green synthesis of multifunctional copper sulfide for efficient adsorption and photocatalysis. **Chemical Papers**, v. 73, n. 9, p. 2297-2308, 2019.
- [3]QI, Hui, et al. One-dimensional CuS microstructures prepared by a PVP-assisted microwave hydrothermal method. **Ceramics International**, v. 38, n. 3, p. 2195-2200, 2012.
- [4] PIRES, F. I. et al. Microwave-assisted hydrothermal synthesis of nanocrystalline SnO powders. **Materials Letters**, v. 62, n. 2, p. 239-242, 2008.

## Materiales sustentables para el desarrollo de fibras de carbón activado (FCA)

Pina, A.C.<sup>\*,a,b</sup>, Ania, C.O.<sup>b</sup>, Tancredi, N.<sup>a</sup>, Amaya, A.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Fisicoquímica, Facultad de química, Udelar, Gral Flores 2124, Montevideo 11800, Uruguay

<sup>b</sup> CEMHTI CNRS (UPR 3079), University of Orléans, 1D Avenue de la Recherche Scientifique CS 90055, Orléans 45071, France

\* acpina@fq.edu.uy

Uno de los grandes desafíos que afronta nuestra generación es el desarrollo sostenible. En este sentido el diseño de nuevos materiales no es ajeno a esta tendencia, volcándose principalmente a la utilización de desechos generados en diversas ramas de la industria. En Uruguay un sector importante es el agroindustrial, generando toneladas de desechos cuya revalorización, convirtiéndolos en materiales de alto valor agregado, se torna imprescindible. Su utilización implica la aplicación de un modelo de economía circular, uno de los objetivos asumidos por el país al firmar de la hoja de ruta de las Naciones Unidas para alcanzar un equilibrio entre sociedad, medio ambiente, economía y desarrollo tecnológico, la Agenda 2030. El uso de estos desperdicios para el desarrollo de FCA es una alternativa interesante por la versatilidad de aplicaciones que estos últimos presentan, principalmente en remediación medio ambiental entre otras [1].

Teniendo en cuenta lo anterior se estudiaron varios materiales, tanto locales como regionales, con la característica en común de tratarse de fibras, y el diferencial de la naturaleza del material (lana de oveja de razas Ideal, Merino y Corriedale, lana de alpaca, arpillera y cáñamo). En todos los casos se desarrollaron FCA a partir de tratamiento térmico en atmósfera oxidante (875 – 950 °C, durante 30 – 240 minutos, y flujo entre 10 y 200 mL.min<sup>-1</sup>, dependiendo de la muestra). Los materiales sintetizados se los caracterizó en su contenido elemental, morfología mediante microscopía electrónica de barrido, espectroscopía de infrarrojo e isothermas de adsorción – desorción de nitrógeno. No en todos los casos se conservó la morfología fibrosa, manteniéndose en los precursores de origen proteico, como en el caso de las lanas (Figura 1), para flujos bajos de gas reaccionante. En todos los casos se obtuvieron materiales principalmente microporosos, cuyas áreas superficiales van desde  $S_{BET} = 600 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$  hasta valores de  $1500 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$  con un  $V_{Tporo} = 0,672 \text{ m}^3\text{g}^{-1}$  y  $V_{micro} = 0,523 \text{ m}^3\text{g}^{-1}$ . La selección estudiada demostró tener potencial para el desarrollo de FCA, logrando en algunos casos características texturales superiores [2, 3] a trabajos previamente reportados para el mismo material [4].

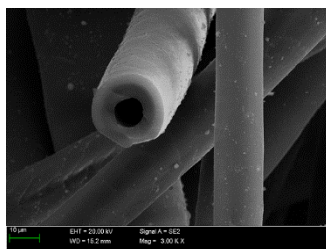


Figura 1. Micrografía de FCA obtenido a partir de lana de oveja.

- [1] J. Yang, P. Juan, Carbon, 44 (2006) 1367 – 1375.
- [2] A.C. Pina, N. Tancredi, et al., MRS Advances, 3 (2018) 3589 – 3600.
- [3] A.C. Pina, A. Amaya, et al., C Journal of Carbon Research, 4 (2018) 24.
- [4] W. Cheng, X. Liu, et al., Powder Technology, 234 (2013) 76 - 83

## Preparación y caracterización de vidrios y vitrocerámicos oxifluoroborato dopados con erbio

Guillermo J. Roth \*<sup>a</sup>, Mauricio Rodríguez<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> Área Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> Centro Universitario Regional del Este, Sede Rocha, Universidad de la República, Rocha, Uruguay

<sup>c</sup> Área Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

\* groth@fq.edu.uy

El estudio de materiales vítreos dopados con tierras raras (TR), se ha incrementado notoriamente en la última década, triplicándose el número de publicaciones en el período 2012-2022. Una de las principales áreas de estudio vinculadas a este tipo de materiales es la óptica, dado que presentan diversas propiedades luminiscentes de interés tecnológico. Entre dichas propiedades se destaca el fenómeno de conversión ascendente (*upconversion*), proceso que consiste en la excitación electrónica de las TR por fotones de baja energía, que resulta en relajaciones radiativas de mayor energía (emisión anti-Stokes). Una aplicación práctica consiste en la construcción de recubrimientos de celdas solares capaces de convertir fotones infrarrojos del espectro solar (energía menor al *bandgap* del material fotoeléctrico) en fotones visibles, útiles para la generación de electricidad [1].

La búsqueda de estrategias para mejorar el proceso de emisión de luz en estos materiales es un campo de estudio en pleno desarrollo [2]. Es conocido que el agregado de fluoruros a las matrices vítreas de base borato-TR permite incrementar la eficiencia de la conversión ascendente, dadas las bajas energías fonónicas de los materiales resultantes [3].

En el contexto del trabajo aquí presentado se prepararon vidrios y vitrocerámicos de base oxifluoroborato dopados con erbio, de composición  $(100-x)[23.3\%BaO, 46.7\%B_2O_3, 30\%NaF], x[ErF_3]$  con  $x = 0.5, 1, 2, 3$  y 5% mol. El método de preparación de los vidrios fue por fusión a 1200 °C. Una parte de las muestras fue caracterizada por calorimetría diferencial de barrido (DSC), y la restante fue sometida a pulido hasta calidad óptica para posteriormente medir el espectro de absorbancia. Los DSC revelaron la transición vítrea ( $T_g \approx 453$  °C) y dos picos de cristalización (520 y 590 °C), asignándose el primer pico a la fase de fluoruro. Para la obtención de vitrocerámicos se ensayaron cristalizaciones a 520 °C por 15, 30 y 60 min. A partir del espectro de absorbancia y de datos de bibliografía, se asignaron las bandas de mayor intensidad observadas en 377 y 520 nm, a las transiciones  $^4I_{15/2} \rightarrow ^2G_{11/2}$  y  $^4I_{15/2} \rightarrow ^2H_{11/2}$  respectivamente. Adicionalmente se obtuvieron los espectros de emisión excitando a dichas longitudes de onda. Los espectros de emisión evidencian procesos de conversión descendente. Para completar la caracterización óptica de los materiales será necesaria la exploración de los fenómenos de conversión ascendente.

[1] F. Lahoz, C. Pérez-Rodríguez, S.E. Hernández, 95 (2011) 1671-1677.

[2] J. QIU, Q. Jiao, D. Zhou, Z. Yang, Journal of Rare Earths, 34 (2016) 341-367.

[3] P.Suthanthirakumar, S.Arunkumar, K.Marimuthu, Journal of Alloys and Compounds, 760 (2018) 42-53.

## Extratos naturais como inibidores de corrosão para o bronze

Luiza R. Santana\*<sup>a</sup>, Viviane G. Marques<sup>a</sup>, Alaor V. Filho<sup>a</sup>, Érica C. Campos<sup>b</sup>, Neftali L. V. Carreño<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais*

<sup>b</sup> *Universidade Federal de Pelotas, Bacharelado em Engenharia de Materiais*

\* luizasantanari@gmail.com

A corrosão é um processo que inevitavelmente afeta as superfícies metálicas e de acordo com a exposição ambiental, diferentes tipos de degradação podem ser esperados nas ligas à base de cobre [1,2]. Os compostos derivados de fontes naturais são biodegradáveis e não contêm metais pesados ou componentes tóxicos em sua composição. Essa característica levou a um enorme aumento nos estudos envolvendo inibidores de corrosão a partir desses compostos orgânicos [3]. Além das características químicas desses compostos, outras vantagens podem ser atribuídas como baixo custo, o fato de ser um recurso renovável, estar prontamente disponível e ser de fácil produção. Extratos de plantas, conseqüentemente se enquadram nesse grupo devido à sua origem biológica. Estas características são justificadas pelos abundantes constituintes fitoquímicos, proporcionando-lhes a capacidade de adsorver em superfícies metálicas e inibir o processo de corrosão. Dentre os constituintes fitoquímicos estão os alcalóides, polifenóis, flavonóides, proteínas, aminoácidos, que contêm heteroátomos com ligações duplas e triplas conjugadas com anéis aromáticos em suas estruturas [3,4]. Com isso, neste trabalho, optou-se pela avaliação da inibição da corrosão do bronze, através das análises de potencial de circuito aberto, espectroscopia de impedância eletroquímica e polarização potenciodinâmica. Dentre os resultados preliminares obtidos, as análises realizadas apontaram que os extratos naturais possuem grande potencial de inibição contra a corrosão.

[1] SILVA DA CONCEIÇÃO, D. K. et al. *Heritage Science*, v. 8, n. 1, p. 40, 2020.

[2] KOSEC, T.; ROPRET, P. *Journal of Cultural Heritage*, v. 52, p. 65–72, 2021.

[3] ARGYROPOULOS, V. et al. In: [s.l.: s.n.]. p. 341–367.

[4] THAKUR, A.; KUMAR, A. *Journal of Bio- and Tribo-Corrosion*, v. 7, n. 2, p. 67, 2021.

## Manufactura aditiva cerámica aplicada a la obtención de piezas de $ZrO_2$ reutilizando descartes de buzas refractarias

Guillermo Silpituca <sup>a</sup>, Elena Brandaleze \* <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Línea de Tecnología de Procesos, Departamento Metalurgia-Centro DEYTEMA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional San Nicolás, Colón 332, 2900, San Nicolás, Argentina*

\* [ebrandaleze@frsn.utn.edu.ar](mailto:ebrandaleze@frsn.utn.edu.ar)

En la actualidad, existe una relevante transición hacia modelos de economía circular [1]. En este contexto, en la industria es necesario generar ciclos cerrados de flujos de materiales y energía. En este trabajo el objetivo es evaluar residuos industriales cerámicos, generados en la producción de buzas refractarias, con miras a valorizarlos como materias primas secundarias utilizando manufactura aditiva por FDM. La manufactura aditiva, constituye una tecnología de obtención de productos de gran interés científico que se proyecta con un importante rol en la sostenibilidad de los procesos industriales, el reciclaje de materiales y como alternativa para resolver retos medioambientales.

Se sabe que los insumos refractarios inciden en forma importante en el costo de la producción de acero y por esta razón, estos desechos industriales se pueden valorizar, adecuándolos para el procesamiento por manufactura aditiva y producir piezas cerámicas para nuevas aplicaciones. Por otra parte, en la industria de materiales refractarios, la fabricación por métodos convencionales conlleva a la acumulación de desperdicios de piezas y elevados costos de producción. La limitación en la fabricación de formas complejas requiere de procesos de mecanizado finales costosos, que consumen tiempo y energía, aumentando los costos de producción. La manufactura aditiva por FDM aplicada a la obtención de piezas cerámicas, requiere mezclar el agregado cerámico con aditivos, para conformar la pieza en verde. Finalmente, la pieza final se logra mediante un tratamiento térmico. El objetivo de este trabajo es reutilizar el material procedente de buzas cerámicas refractarias de  $ZrO_2$  aplicadas en la colada continua de acero, producidas con fallas o rotas durante la instalación o manipuleo. En particular, el estudio plantea cuatro etapas: a) Etapa 1: en la que se realiza la caracterización de las buzas refractarias originales contemplando la determinación de propiedades físicas (densidad y porosidad aparente) y una caracterización estructural mediante microscopía óptica y electrónica de barrido (SEM). b) Etapa 2: en la que se prepara la pasta para impresión. A tal fin, se muelen los desechos de buzas de  $ZrO_2$ , se determina la curva granulométrica, se identifican las fases cristalinas presentes mediante difracción de rayos X, se seleccionan los aditivos aglomerantes, se prepara la pasta y se realizan los ensayos de impresión. Además, se evalúa el comportamiento térmico de muestras en verde mediante análisis térmico diferencial DTA TG. c) Etapa 3: se imprimen las muestras mediante manufactura aditiva (FDM), se realiza la evaluación dimensional de las capas generadas en la muestra en verde, se efectúa la caracterización microestructural y una evaluación de la resistencia mecánica mediante ensayo de compresión. d) Etapa 4: en base al comportamiento térmico se diseña el perfil de tratamiento térmico que se lleva a cabo manteniendo rampas de calentamiento controladas. La muestra final se caracteriza contemplando la determinación de propiedades físicas finales (densidad y porosidad aparente), se realiza la caracterización estructural mediante microscopía óptica y electrónica de barrido (SEM) y la resistencia mecánica a través de ensayos mecánicos de compresión. Los resultados del estudio han permitido comprobar que es posible reciclar los desechos de buzas de  $ZrO_2$ , evitando su acumulación y valorizando esta materia prima alternativa a través de la generación de piezas por manufactura aditiva aplicando FDM desarrollando buenas propiedades físicas y mecánicas. Esto promueve el reciclado de desechos industriales, disminuye el uso de recursos no renovables y contribuye a preservar el medio ambiente.

[1] A. Romani, V. Rognoli and M. Levi, Sustainability, 13, 7269 (2021), 1-23.

## Estudo da estabilidade de filmes de PEAD/PANI em condições ambientais

Marielle Bastos, Kaique de S. Silva, Alana F. Golin

<sup>a</sup> *Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu – Paraná – Brasil*

m.bastos.2019@aluno.unila.edu.br

A polianilina (PANI) é um polímero semicondutor frequentemente estudado devido às suas singulares propriedades elétricas. Quando a PANI é associada ao polietileno de alta densidade (PEAD) são propostos filmes que, além das propriedades elétricas, também apresentam boas propriedades mecânicas, possibilitando sua aplicação no campo da eletrônica orgânica [1]. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho é investigar a estabilidade de filmes de PEAD/PANI submetidos a condições climáticas (intempéries) para verificar sua viabilidade de aplicação em dispositivos eletrônicos que sejam capazes de operar mesmo expostos ao ambiente. Os filmes de PEAD/PANI foram preparados via polimerização *in situ* da PANI em substrato flexível de PEAD e, posteriormente, submetidos a processos de degradação. Normalmente, para investigar a estabilidade ambiental de materiais poliméricos as amostras são submetidas a ensaios de envelhecimento ambiental, mas, como testes desse tipo demandam longo tempo, uma alternativa é a utilização de câmaras de envelhecimento acelerado [2]. Por esta razão, os filmes de PEAD/PANI foram submetidos a ensaios de envelhecimento acelerado realizados em uma câmara *Bass Ultravioleta - modelo UUV*, programada para executar ciclos de 12 horas a 50°C, sendo 8 horas de exposição a raios UV e 4 horas de exposição a umidade e spray de água. Os filmes foram expostos a 1, 2, 8, 9 e 11 ciclos e avaliados por meio de microscopia óptica antes e após os ensaios para avaliar a degradação das amostras em função do tempo de exposição. A partir dos resultados obtidos, foi observado que em todas as amostras não houve variação dimensional e conformacional, porém, com o aumento do tempo da exposição, houve mudança da coloração superficial do sistema, isto é, apenas na PANI que recobre o PEAD. Inicialmente, a PANI possuía coloração verde, característica da PANI em estado sal de esmeraldina, e após o ensaio passou a apresentar coloração azul, característica da PANI em estado base esmeraldina. Assim, identificou-se que a PANI quando exposta por longos períodos a intempéries tem suas propriedades elétricas alteradas de semicondutora para isolante. Conseqüentemente, filmes de PEAD/PANI não possuem estabilidade elétrica para serem aplicados como dispositivos eletrônicos orgânicos para operação direta em ambientes úmidos e/ou com incidência de radiação UV. O que não descarta a possibilidade de uso do PEAD/PANI em ambientes livres dessas condições ambientais.

[1] A.F. Golin, Estudo das propriedades elétricas de filmes finos de PANI em substrato flexível de PEAD sob deformação mecânica, Tese, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2019.

[2] M.A. de Paoli, Degradação e Estabilização de Polímeros, 2ra ed., Chemkeys, 2008.



## Obtención y caracterización de quitosano fúngico

Mauricio Cardoso\* <sup>a,b</sup>, Helena Pardo <sup>c</sup>, Silvana Alborés <sup>a</sup>, Eloisa Arrarte <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Área Microbiología, DEPBIO, Facultad de Química, Udelar, General Flores 2124, Montevideo, Uruguay

<sup>b</sup> Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, General Flores 2124, Montevideo, Uruguay

<sup>c</sup> Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, General Flores 2124, Montevideo, Uruguay

\* mcardoso@fq.edu.uy

El quitosano ha tenido aplicaciones en diversas áreas incluyendo la biotecnología, biomedicina, agroalimentaria y agricultura, otorgando una ventaja competitiva al integrar una tecnología sostenible y ecológica [1]. A diferencia de la mayoría de los polisacáridos de origen natural, el quitosano es un polisacárido básico, con grupos amino que permiten una fácil funcionalización, ampliando aún más sus aplicaciones [2]. Asimismo, presenta actividad antibacteriana y antifúngica, y la capacidad de inducir respuestas de resistencia en plantas [3]. En los últimos años la producción de quitosano a partir de fuentes fúngicas ha ganado atención por las ventajas que presenta respecto a las fuentes convencionales (exoesqueleto de artrópodos), por obtener mejor homogeneidad en la longitud de las cadenas poliméricas, mayores grados de desacetilación y solubilidades y reducción del potencial de alergenicidad [4]. Otra ventaja del quitosano fúngico con respecto al de origen animal es la producción a gran escala sin depender de factores ambientales [4]. A partir de estos antecedentes, en este trabajo se realizó la extracción de quitosano a partir de cuatro hongos que se utilizan para otras aplicaciones biotecnológicas, descartando su biomasa: *Phanerochaete chrysosporium*, *Punctularia atropurpurascens*, *Trichoderma harzianum* y *Rhizopus stolonifer*. Para la obtención de micelio fúngico se emplearon matraces conteniendo 200 mL de medio PDB (Potato Dextrose Broth), los cuales fueron inoculados con discos provenientes de micelio fresco crecido en placas con medio PDA (Potato Dextrose Agar). Los matraces fueron incubados a 28 °C y 180 rpm, durante 3 a 5 días, dependiendo de la cepa, y la biomasa fúngica se separó por filtración. La extracción de quitosano se realizó con micelio seco, al cual se le realizó diferentes tratamientos térmicos en una solución de NaOH 1 mol L<sup>-1</sup> para la desacetilación de la quitina, uno a 121 °C durante 15 min, y el otro a 95 °C por 24 h. La fracción insoluble se separó mediante centrifugación a 11000 rpm, 15 min y se lavó con agua destilada hasta neutralidad (pH 7). La fracción insoluble se colocó en ácido acético 2 % a 95 °C por 24 h, con el fin de disolver el quitosano, producto de la desacetilación previa. Luego de centrifugar, se descartó la fracción insoluble, y al sobrenadante se añadió NaOH 2 mol L<sup>-1</sup> hasta ajustar el pH a 10. El precipitado se lavó con agua y se secó a 45 °C hasta peso constante. Se determinó los porcentajes de rendimiento de biomasa, los cuales variaron entre 1,7 a 6,6 g/L de medio, dependiendo de la cepa. Los sólidos se caracterizaron mediante espectroscopía FT-IR, termogravimetría y difracción de rayos X, comparándolos con quitosano comercial (Sigma-Aldrich, bajo peso molecular). Si bien para la cepa de *P. chrysosporium* no fue posible la obtención de quitosano, sí se obtuvo para las otras cepas. En particular, a partir de *R. stolonifer* se obtuvo un rendimiento comparable al obtenido en bibliografía, de 5,3 mg quitosano/g de micelio seco. Con estos resultados promisorios se trabajará en la mayor producción y estudios complementarios de caracterización del quitosano fúngico. Agradecimientos: Proyecto ANII FMV\_1\_2021\_1\_167206, PEDECIBA y UDELAR

- [1] Z. Ma, A. Garrido-Maestu and K. C. Jeong, *Carbohydrate Polymers* 176, 257-265 (2017).
- [2] K. Shukla, A. K. Mishra, O. A. Arotiba and B. B. Mamba, *International Journal of Biological Macromolecules* 59, 46-58 (2013).
- [3] J.-W. OH, S. C. Chun and M. Chandrasekaran, *Agronomy* 9 (1), 21 (2019).
- [4] L. Yang, X. Li, C. Lai, Y. Fan, J. Ouyang and Q. Yong, *Biotechnology & Biotechnological Equipment* 31 (6), 1160-1166 (2017).

## Nanocellulose from beer production waste: evaluation of the potential extraction by acid hydrolysis

Vitor H. Lima <sup>a</sup>, Samir L. Mathias <sup>a</sup>, Alessandra A. Lucas <sup>b</sup>, Aparecido J. de Menezes\* <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Graduate Program in Materials Science - PPGCM of the Federal University of São Carlos – UFSCar / Sorocaba, Brazil

<sup>b</sup> Graduate Program in Materials Science and Engineering- PPGCEM of the Federal University of São Carlos – UFSCar / São Carlos, Brazil

\* jrmenezes@ufscar.br

Industrial waste usage for technological applications has been gaining ground in different segments and applications [1]. One of the prominent sectors is Material technology, where these residues can be used to obtain the raw material for obtaining fillers and reinforcement in thermoplastic polymeric materials [2,3]. Cellulose has been used as a source of study and has several applications in materials, such as reinforcement, load, or chemical surface modifications. The nanocellulose, which is obtained from different chemical, mechanical and biological processes, can be in the form of cellulose nanofibrils (CNFs), which are present in crystalline and amorphous regions along it, and cellulose nanocrystals (CNCs) which reveal only the crystal region [1,2,3]. The material in this work is malt bagasse, which is currently the waste generated in the beer industry by bulk and shows no alternative reuse and application in Material technology. Was determined the chemical composition of the fibers and applied a chemical bleaching process to remove components such as lignin and hemicellulose in preparation for the fibers for obtaining nanocellulose through acid hydrolysis. Hydrolysis was performed using H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> at two concentrations, 44% (w/w) and 64% (w/w), at temperatures of 40°C and 50°C for the samples subjected to the acid solution at 44%, besides that, it was used at 40°C, 50°C and 60°C for samples with 64% solution. For the samples, 44/40 and 44/50 were obtained CNFs and for the 64%, the result obtained was CNCs. Natural and bleached fibers, along with nanocellulose, obtained through different concentrations of H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> and temperature were characterized by Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR), Atomic Force Microscopy (AFM), Scanning Electron Microscopy (SEM) and Field Emission Scanning Electron Microscopy (FESEM), X-Ray Diffraction (XRD) and Thermogravimetry (TG).

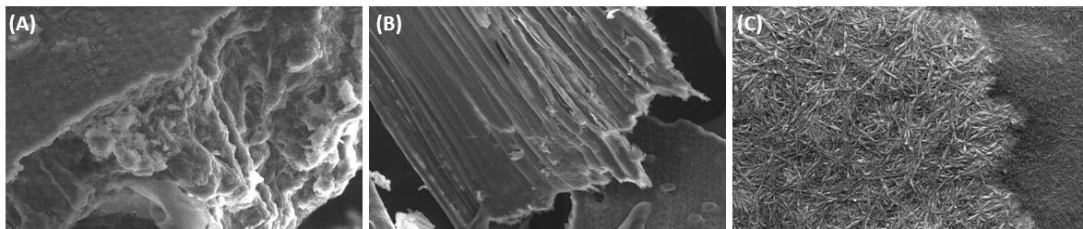


Fig. 1. SEM images (A) raw fiber - 800x (B) bleached fiber - 800x. FESEM image (C) CNC 64/50 - 30.000x

[1] Dufresne, A. 2012. Nanocellulose: From Nature to High-Performance Tailored Materials, 2012.

<https://doi.org/10.1515/9783110480412>

[2] Flauzino Neto, W.P., Silvério, H.A., Dantas, N.O., Pasquini, D., 2013. Extraction and characterization of cellulose nanocrystals from agro-industrial residue - Soy hulls. *Ind. Crops Prod.* 42, 480–488.

<https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2012.06.041>

[3] Habibi, Y., Lucia, L.A., Rojas, O.J., 2010. Cellulose nanocrystals: Chemistry, self-assembly, and applications. *Chem. Rev.* 110, 3479–3500. <https://doi.org/10.1021/cr900339w>

## Produção de carvão ativado de caroço de pêssigo para adsorção de corante

Nicholas Fernandes de Souza<sup>a</sup>, Cristiane Ferraz de Azevedo<sup>a</sup>, Fernando Machado Machado<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, R. Gomes Carneiro, 01 - Balsa, Pelotas - RS

\*nicholasfs97@gmail.com

Atualmente, a preocupação com a contaminação química de meios hídricos desencadeou a necessidade de aprimorar técnicas para remediação desse problema [1]. Dentre as técnicas disponíveis, a adsorção é uma das mais promissoras e eficazes para o tratamento de efluentes aquosos por ser uma técnica de fácil aplicação e escalonamento, alta eficiência e baixo custo [2]. Esse processo baseia-se na habilidade de determinados sólidos concentrarem em suas superfícies certas substâncias presentes em fluidos. Tais sólidos recebem o nome de adsorvente e a espécie que se concentra na sua superfície é denominada adsorvato [3]. O carvão ativado (CA) é um adsorvente eficiente e tem sido largamente utilizado para a remoção de muitos contaminantes de meios aquosos devido ao alto volume de poros, elevada área superficial, estrutura interna porosa e grupos funcionais que resultam em alta capacidade de adsorção [4]. A produção de CA em larga escala é limitada pelo alto custo, logo, biomassas alternativas têm sido empregadas visando à redução de custos. Uma vez que a cidade de Pelotas é o maior produtor de pêssigo nacional [5], e conseqüentemente acaba por gerar um grande volume de resíduos de caroço, o presente trabalho visa aplicar essa biomassa como matéria-prima na produção de CA, através de ativação química com  $ZnCl_2$  na proporção 1:0,5 (biomassa : $ZnCl_2$ ), via rota assistida por micro-ondas. A seguir, o adsorvente foi empregado na remoção do corante Azul de Metila (AM) do meio aquoso. Foram realizados testes em batelada, onde foi preparado uma solução estoque de AM na concentração de  $500 \text{ mg.L}^{-1}$ . Posteriormente foram realizadas as diluições de soluções ( $50, 100, 150, 200, 250$  e  $300 \text{ mg.L}^{-1}$ ) utilizadas nos testes de adsorção. A quantificação de corante remanescente após o ensaio de adsorção foi realizada em um Espectrofotômetro UV-Vis Bel M51 no comprimento de onda  $663 \text{ nm}$ . Através da determinação da absorbância das soluções, foram calculados os percentuais de remoção. Na Figura 1 é possível verificar que, nas concentrações de  $50$  e  $100 \text{ mg.L}^{-1}$ , o percentual de remoção do corante foi de  $99,49\%$  e  $99,87\%$ , respectivamente. Ainda, quando a concentração aumenta, o percentual de remoção diminui, tal efeito é atribuído à saturação dos sítios ativos disponíveis do adsorvente para o processo de adsorção. Com isso, conclui-se que o caroço de pêssigo pode ser utilizado como uma ótima alternativa de baixo custo e boa eficiência na produção de carvão ativado, ficando evidente o potencial de remoção do AM dos meios hídricos.

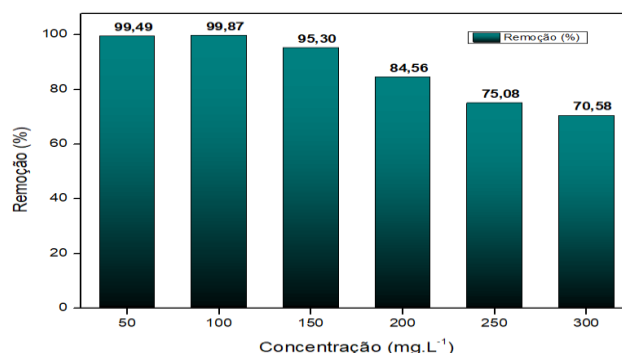


Figura 1: Percentual de remoção do AM do meio aquoso utilizando CA.

- [1] C. F. De Azevedo, et al., *Chemical Engineering Journal*, 452 (2023) 140102.
- [2] O.S. Escobar, et al., *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9 (2021) 105553.
- [3] D.M. Ruthven, *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*, John Wiley and Sons, New York, 1984.
- [4] D.L.C. Rodrigues, et al., *Environ Sci Pollut Res*, 27 (2020) 41394–41404.
- [5] S.A. Torrellas, et al., *Microporous and Mesoporous Materials*, 134 (2010) 181-188.

## Biossorvente de óleo de rápida obtenção

Viviane G. Marques \*<sup>a</sup>, Gian F.R. Paganotto<sup>a</sup>, Luiza R. Santana<sup>a</sup>, Alaor Valério Filho<sup>a</sup>, Neftalí L.V. Carreño<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, Pelotas-RS, Brasil.

\* vivianegobelmarques@gmail.com

A poluição gerada pelo derramamento de óleo gera sérios danos ao ambiente aquático [1] e com isso diversas pesquisas são realizadas visando obter métodos eficazes para a remoção do óleo da água [2], sendo o uso de sorventes considerado um método efetivo para esse fim [3]. Os sorventes mais utilizados para a remoção de óleo não são biodegradáveis, causando uma ameaça secundária ao ambiente. Um biopolímero totalmente biodegradável que pode substituir polímeros derivados de petróleo é o PLA (*Poly-lactic acid*), produzido a partir de fontes renováveis [4], o qual já foi relatado na literatura como sorvente de óleo [4,5]. O objetivo deste trabalho foi produzir fibras de PLA utilizando uma técnica de alta taxa de produção e avaliar a morfologia e eficiência na sorção de óleo das fibras obtidas. Para a produção das fibras deste trabalho foi utilizada a técnica *centrifugal spinning* e utilizada como matéria-prima uma solução de PLA dissolvido em clorofórmio, mantendo-se fixos os parâmetros de velocidade de rotação e distância do coletor, variando-se o diâmetro do bico injetor. As fibras formadas foram caracterizadas com relação a sua morfologia através de microscopia eletrônica de varredura, o diâmetro médio das fibras foi obtido com auxílio do *software image J*, e também foi verificado o potencial de absorção de óleo das fibras obtidas. A morfologia das fibras mostra uma não uniformidade nas fibras, apresentando variação no diâmetro, que pode ser atribuída ao *delay* até atingir a velocidade de rotação utilizada no processo, sendo obtidos diâmetros médios entre 3,629  $\mu\text{m}$  e 8,169  $\mu\text{m}$ . Comparado com a literatura [4,5], testes preliminares de sorção de óleo com as fibras de PLA obtidas nesse trabalho mostraram eficiência superior e sugerem que sejam promissoras na utilização para esse fim. Assim, variações nos parâmetros de produção das fibras e modificações superficiais para formação de poros serão avaliados na continuidade deste trabalho com relação a sua eficiência na sorção de óleos visando a utilização na separação de óleo em água em acidentes ambientais como uma alternativa rápida e eficiente.

[1] A.M. Lazim et al., Polym. Test., 73 (2019) 39-50.

[2] N. Zhang et al., J. Environ. Chem. Eng., 10 (2022) 107257:1-23.

[3] A.L.A. Abirami et al., Sep. Purif. Technol., 234 (2020) 116095:1-9.

[4] T. Zhang et al., J. Polym. Environ., 28 (2020) 812-825.

[5] V. Catania et al., N. Biotechnol., 58 (2020) 25-31.

## Alternativas de valorización de lodos, UPM

Gemma Rodríguez <sup>a</sup>, B.Stela Sabalsagaray <sup>a</sup>, Carola Romay <sup>a</sup>, Daniel Godoy <sup>a</sup>, Iliana Rodríguez <sup>a</sup>,  
Madelon Iglesias <sup>b</sup>, Anyela Molina <sup>a</sup>

<sup>a</sup>UDELAR, Facultad de ingeniería, Instituto de Ensayo de Materiales, Julio Herrera y Reissig 565

<sup>b</sup>UDELAR, Facultad de Arquitectura Diseño y Urbanismo, Instituto de Tecnologías, Bvar. Artigas 1031

\* amolina@fing.edu.uy

El presente trabajo corresponde al Proyecto “Alternativas de Valorización de Lodos, UPM”, CTS\_X\_2016\_1\_1 / P\_2019\_06, por parte de equipos de trabajo de los Institutos de Ensayo de Materiales (IEM) y de Mecánica de los Fluidos e Ingeniería Ambiental (IMFIA) de la Facultad de Ingeniería de la UdelAR, con financiación otorgada por el Centro Tecnológico del Agua (CTA Agua).

La planta de tratamiento de agua de UPM no está prevista para producir agua para consumo humano (agua potable), pero el proceso de tratamiento es análogo a un proceso de potabilización. Este proceso genera un subproducto denominado “lodo de tratamiento de agua” (LTA). La composición química de este lodo depende de los agentes floculantes usados, su proporción y de las características del agua bruta (origen superficial o subterráneo, tipo de suelos por donde transcurre o la clase de residuos vertidos aguas arriba de la toma), por lo que, para su utilización como insumo en un proceso de economía circular, el LTA resultante debe caracterizarse en cada caso particular.

Se comenzó el proyecto haciendo una búsqueda bibliográfica sobre artículos especializados en la temática a los efectos de analizar la forma en que diferentes grupos de investigación han abordado la temática de la valorización de lodos de agua bruta para materiales de construcción. Estas referencias bibliográficas presentaron un abanico significativo de posibles alternativas de aplicación como componentes adicionales a cemento portland, materiales cementíceos, materiales cerámicos, geopolímeros, materiales en base a suelo-cemento.

Posteriormente se caracterizaron los lodos, en estado húmedo y en estado deshidratado. En lodos húmedos se controló el pH y humedad y en lodos deshidratados, densidad, pérdida por calcinación, difracción de rayos X, composición química mediante FRX, curvas TGA y DTGA, morfología de los lodos mediante MEB. En base a los estudios realizados se determinó la factibilidad para su empleo en materiales cerámicos.

Se realizaron prototipos cerámicos con 10 % y 20 % de sustitución de arcilla por lodos crudos y lodos deshidratados sometidos a cocción a temperaturas de 700, 800, 900 y 1000°C.

En total se fabricaron 132 prototipos, que permitieron la ejecución de 504 ensayos (resistencia a compresión, retracción, porosidad y absorción de agua fueron ejecutados en el IEM; contenido de SO<sub>3</sub> y lixiviación de sulfatos, en laboratorio externo). Estos estuvieron dirigidos a evaluar la viabilidad del empleo de los lodos en materiales cerámicos.

Los resultados permitieron observar comportamientos diferentes en los cerámicos elaborados con lodo crudo y lodo deshidratado realizados con los distintos porcentajes de sustitución a diferente temperatura de cocción. Cuanto mayor es el % de lodo incorporado disminuyen los valores en la resistencia, aumentan los valores de porosidad y de retracción determinándose que los mejores resultados fueron los obtenidos con lodos deshidratados a 1000°C.

## Influencia de resinas de *tack* em formulações elastoméricas e metodologias de avaliação aplicadas

Amanda Moresco<sup>a\*</sup>, Suélen Moresco<sup>b</sup>, Janaina da Silva Crespo<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade de Caxias do Sul, Rua Francisco Getúlio Vargas, 1130, 95070-560 Caxias do Sul, RS, Brasil <sup>b</sup> Vipal Borrachas, Rua Buarque de Macedo, 365, 95320-000 Nova Prata, RS, Brasil \* amoresco3@ucs.br

O fenômeno de adesão é relevante em muitas áreas científicas e tecnológicas e tem se tornado, em tempos recentes, um campo muito importante de estudo. Pode-se afirmar que a aderência ou *tack* é uma propriedade muito importante na indústria da borracha pois, a mistura de certas matérias primas resulta em produtos com características coesivas e pegajosas, porém, os estudos envolvendo essa propriedade remetem apenas a tempos antigos [1]. Observa-se assim que hoje em dia é de grande interesse aprofundar os conhecimentos sobre o *tack* na indústria, pois vive-se em uma constante e grande evolução, sempre aprimorando e aperfeiçoando processos. Dessa forma, na literatura estão descritas diversas teorias que explicam os mecanismos de adesão dos materiais: adsorção, ancoragem, ligação química, camadas fracamente, etc. [2]. A aderência é uma propriedade muito importante nos compostos de borracha e com isso muitos dispositivos foram desenvolvidos para poder fazer sua medição. Na literatura estão descritos diversos instrumentos e equipamentos que foram desenvolvidos ao longo dos anos para realizar medições de aderência, porém, conforme é amplamente citado na literatura por muitos autores, por diversos motivos até hoje o instrumento ideal ainda não foi está disponível [3].

Desta forma, este estudo visa avaliar a influência de diferentes tipos de resinas de *tack* em formulações de compostos elastoméricos, bem como desenvolver uma metodologia de teste simples e reprodutível para avaliar o *tack* dessas composições elastoméricas utilizando a borracha sintética (SBR). Foram desenvolvidas formulações utilizando-se diferentes resinas de *tack*: fenol-formaldeído, hidrocarbônicas, cumarona e breu. Essas resinas, foram avaliadas através da análise de FTIR para verificação dos grupos funcionais [4]. A caracterização das formulações foi realizada através de propriedades reométricas, viscosidade Mooney, densidade de ligações cruzadas por inchamento em solvente, dureza, resistência à abrasão, resistência à tração e ao rasgamento e DSC. O teste de *tack* foi realizado com os compostos não vulcanizados, seguindo o método desenvolvido, sendo as amostras colocadas entre garras, que foram desenvolvidas e adaptadas ao equipamento Instron. Essas amostras têm medidas definidas, deixou-se elas em contato por alguns segundos e finalmente as garras foram separadas para realizar a medição da força necessária para o descolamento das amostras. Todos os ensaios foram realizados nos laboratórios de análises da empresa Vipal Borrachas S.A.

A metodologia desenvolvida demonstrou-se eficiente para a obtenção dos resultados, sendo uma metodologia de simples aplicação e reprodutível. As resinas derivadas de fenol-formaldeído apresentaram os melhores valores de *tack*, 25,5 kgf/cm (formulação elastomérica padrão 13,1 kgf/cm) e com isso demonstram uma certa afinidade com a matriz, exceto para a resina derivada de fenolformaldeído do tipo resol, que apresentou o pior valor de *tack* 11,7 kgf/cm. Depois tem-se as resinas derivadas de hidrocarbonetos, que são resinas aromáticas altamente compatíveis com os elastômeros sintéticos. E por fim as resinas de cumarona e breu, que também apresentaram valores coerentes para a propriedade avaliada, indicando assim também uma certa compatibilidade com a matriz elastomérica.

[1] Hamed, G., Tack and green strength of elastomeric materials. Rubber Chemistry and Technology, 1981. 54(3): p. 576-595.



- [2] Satas, D., Handbook of pressure sensitive adhesive technology. 1989.
- [3] Awaja, F., et al., Adhesion of polymers. Progress in polymer science, 2009. 34(9): p. 948-968.
- [4] Faria, T.D.M., Adesivo de borracha termoplástica reforçado com nanoargila. Universidade Estadual de Campinas, 2008.

## Magnetic fluorescent materials for latent fingerprint

Elisa M. N. de Oliveira<sup>a\*</sup>, Cassio F. Reis<sup>a</sup>, Ricardo M. Papaléo<sup>b</sup>, Michèle O. de Souza<sup>a</sup>, Naira M. Balzaretto<sup>a</sup>, Leandra F. Campo<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS - Brasil

<sup>b</sup>Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS - Brasil

\**elisa.magno@ufrgs.br*

Forensic science uses different materials to reveal evidence in criminal processes, and fingerprints constitute one of the most important categories of physical evidence that encompasses this idea. The papilloscopy technique enables the identification of individuals through their fingerprints, which each person has their unique fingerprint brand individually. The possibility to analyze fingerprint identification, often its necessary to use materials to enhance latent fingerprints (LFP), because LFP are invisible to the naked eye, and therefore a revealing powder is used to make them visible, which has good adhesion and dispersion on the substrate. Magneto fluorescent materials in the powder phase are a good alternative, because can be manipulated and guided through an external magnetic field, such a brush, and still have fluorescence emission, making it easier to obtain contrast between the lines of LFP and the substrate [1]. In this work, magnetic nanoparticles (NPs) were synthesized, and a fluorescent dye derived from hydroxybenzazol was attached to their surface, according to the methodology adapted from Oliveira et.al. and Reis et. al. [2,3]. The disclosure method and data processing were carried out following the Guidelines for the Assessment of Fingerprint Detection Techniques, which *Phase 1 technique* were used [4]. The analysis was carried out using the powder technique, both with the synthesized NPs and with a similar commercial powder for a better comparison between the results. Briefly, sebaceous fingerprint samples were collected from male (4) and female (4) individual donors and then deposited on a glass substrate by split impression. After 24h, the fingerprints were revealed with both NPs and commercial materials. The photos were collected by 12 megapixel camera with a resolution of 4608x2592 pixels. The images showed that the NPs were homogeneous, due to the intense emission of green fluorescence, when placed under ultraviolet light at a wavelength of 365 nm, allowing it to be easily detected and photographed. No significant difference was observed in the disclosure results between the gender of donor individuals. However, the images demonstrate that there is a certain dependence of the amount of sebaceous material deposited, with the way of individual donors carried out the deposit on the substrate (such weak, medium and strong fingerprint donors). More sebaceous compounds (fatty acid) content present in the deposited fingerprints, more enhanced were the fingerprints with the addition of the revealing powders. Nevertheless, the data were satisfactory in comparison with a commercial material, proving to be promising as a powder for developing latent fingerprints.

[1] Barros, H.L. et. al. Foren. Sci. Int. 263 (2016) 83-91.

[2] Oliveira, E. M. N., et. al. Chem. Phys, Chem., 17 (2016) 3176 – 3180.

[3] Reis, Cassio Fernando. Nanopartícula magnético-fluorescente, seu processo de obtenção, seu uso e um processo de revelação de impressões digitais. BR 102020012164-2 A2.

[4] International Fingerprint Research Group (IFRG). 64 (2014) 177.

## Influência da mistura de elastômeros nas propriedades físico-mecânicas de formulações elastoméricas

Daiane Omizzollo Negri<sup>a, b, \*</sup>, Suélen Moresco<sup>b</sup>, Janaina da Silva Crespo<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade de Caxias do Sul, Rua Francisco Getúlio Vargas, 1130, 95070-560 Caxias do Sul, RS, Brasil

<sup>b</sup> Vipal Borrachas, Rua Buarque de Macedo, 365, 95320-000 Nova Prata, RS, Brasil

\* donegri@ucs.br

O desenvolvimento de blendas tem o intuito de atender a diversos requisitos industriais como a necessidade de facilitar o processamento e ampliar a faixa de propriedades, seja variando o tipo, quantidades relativas ou morfologia de cada componente. As blendas obtidas por meio de polímeros com diferentes propriedades físicas permitem melhorar as propriedades através de uma combinação de cada componente do sistema. Uma das vantagens que as blendas apresentam é a facilidade de ajustar as propriedades às necessidades de uso e são importantes para gerar propriedades mecânicas, químicas ou de barreiras desejadas e melhorar a processabilidade de polímeros [1].

Tendo em vista a importância dos polímeros nas formulações elastoméricas, o presente trabalho visa avaliar a influência da mistura de diferentes polímeros como borracha natural (NR), copolímero de butadieno e estireno (SBR) e polibutadieno (BR), nas propriedades físico-mecânicas de formulações elastoméricas. As formulações não vulcanizadas foram caracterizadas através de ensaios reométricos e reológicos. Enquanto que, as formulações vulcanizadas foram avaliadas em relação às propriedades de dureza, resistência à abrasão, resiliência, resistência ao rasgamento e à tração.

Dessa forma, verificou-se que o tempo de segurança de processo ( $t_{s2}$ ) e o tempo ótimo de vulcanização ( $t_{90}$ ) das formulações contendo apenas polímeros puros foram superiores para as formulações com SBR e BR. Para as formulações envolvendo a mistura de polímeros observou-se que a formulação contendo a mistura de SBR/BR apresentou maiores valores de  $t_{s2}$  e  $t_{90}$ . Observou-se que os melhores resultados de tensão na ruptura, módulo a 200% e alongamento na ruptura foram obtidos nas formulações contendo apenas NR e na mistura de polímeros NR/SBR. As formulações contendo NR apresentaram um aumento do desgaste por abrasão. Para as formulações contendo mistura de polímeros obteve-se resultados similares de desgaste por abrasão nas misturas de NR/SBR e NR/BR, enquanto que a mistura contendo apenas polímeros sintéticos apresentou redução nesta propriedade. Para o teste de resiliência observou-se que nas formulações contendo apenas os polímeros puros, a formulação com BR apresentou maiores valores nesta propriedade. Para as formulações envolvendo a mistura de polímeros, a maior resiliência foi obtida na formulação contendo NR/BR.

Desse modo, foi possível concluir que as formulações contendo NR e mistura de NR/SBR apresentam maior resistência a tração, enquanto que as formulações envolvendo SBR e BR e a mistura de SBR/BR possuem maior resistência ao desgaste.

[1] VOSSSEN, C. A. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo. 2009.

## Obtenção e caracterização de nanofibras de niobato de potássio

Gian F. R. Paganotto \*<sup>a</sup>, Viviane G. Marques<sup>a</sup>, Francielen S.M. Rodrigues<sup>a</sup>, Cátia L. Ücker<sup>a</sup>,  
Cristiane W. Raubach<sup>a</sup>, Sérgio S. Cava<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Pelotas, Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, Pelotas-RS, Brasil.

\* gianpaganotto@gmail.com

O niobato de potássio tem apresentado excelentes propriedades tais como propriedade óptica não linear, propriedades piezoelétricas, ferroelétricas e fotocatalíticas [1-3]. Aliado a isso, sabendo-se que materiais nanoestruturados unidimensionais tais como os nanotubos, nanofios e nanofibras têm apresentado grande interesse científico devido ao grande potencial de aplicações tecnológicas, a produção de nanofibras de niobato de potássio pode gerar uma gama de aplicações unindo as excelentes propriedades de ambos [4]. A produção de fibras cerâmicas pode ser realizada pela técnica *centrifugal spinning*, a qual está baseada na ação da força centrípeta para produção de nano/microfibras de polímeros fundidos ou em solução [5,6]. Esse trabalho tem como objetivo a obtenção de nanofibras de perovskitas de niobato de potássio (KNbO<sub>3</sub>) através da técnica *centrifugal spinning*. Nesse trabalho, a produção das fibras começa com a solubilização do polímero utilizado como matriz (poliestireno) em clorofórmio sob agitação magnética constante. Posteriormente, partículas de KNbO<sub>3</sub> foram adicionadas a solução e mantidas sob agitação até dispersão das partículas. A solução com as partículas dispersas foi levada ao equipamento de *centrifugal spinning* onde as fibras foram produzidas. As fibras obtidas foram caracterizadas com relação a sua morfologia por microscopia eletrônica de varredura onde foi possível verificar a formação de fibras ultrafinas, com presença de *beads* e partículas. Com os resultados preliminares observa-se a possibilidade de obtenção de um material fibroso ultrafino com propriedades de interesse tecnológico. No desenvolvimento deste trabalho serão realizadas adaptações no processo de produção das fibras e avaliadas propriedades de interesse das fibras obtidas como suas propriedades térmicas, estruturais, piezoelétricas e fotocatalíticas.

[1] A. Balilonda et al., Adv. Fiber Mater., 1 (2019) 101–125.

[2] D.T. Trung, J.G. Fisher, Appl. Sci., 10 (2020) 2131 (1-16).

[3] S-Y. Sun et al., J. Alloys Compd., 854 (2021) 156738 (1- 7).

[4] X. Xiao et al., NANO, 15 (2020) 2050086 (1-14).

[5] V. Padilla-Gainza et al., Polym. Adv. Technol., 31 (2020) 2601–2614.

[6] L. Xia et al., Fibers Polym., 21 (2020) 1422-1429.

## Nanopartículas metálicas biogénicas sintetizadas a partir de micelio de *Trichoderma* spp. para el control de fitopatógenos

Paula Sanguineto\*<sup>a</sup>, Ricardo J. Faccio<sup>b</sup>, Eduardo R. Abreo<sup>c</sup>, Silvana V. Alborés<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Udelar

<sup>b</sup> CentroNanoMat, Área de Física, DETEMA, Facultad de Química, Udelar  
<sup>c</sup> Laboratorio de Bioproducción, Plataforma de Bioinsumos, INIA Las Brujas

\* paulasd@fq.edu.uy

Las partículas metálicas de escala nanométrica son ampliamente estudiadas debido a sus diversas aplicaciones, las cuales se fundamentan por las propiedades ópticas y fisicoquímicas que poseen [1]. Como consecuencia de esto es que resulta muy promisorio su uso en la salud, tecnología, industria alimentaria y el área agrícola. Trabajos recientes demuestran su potencial uso en el control de fitopatógenos y la promoción del crecimiento vegetal, con alto impacto en la agricultura [2].

La síntesis de nanopartículas por métodos biológicos surge como alternativa a otras metodologías químicas y físicas ya conocidas. Se considera que es más ventajosa que estas últimas por el uso de condiciones de reacción de menor impacto ambiental. Asimismo, en la síntesis biogénica a partir de hongos se obtienen nanopartículas estabilizadas por un *capping* de naturaleza proteica [3].

En el presente trabajo se evaluó la biosíntesis extracelular de nanopartículas de plata (AgNPs) y cobre (CuNPs) por cepas del hongo *Trichoderma* aisladas de cultivos de arroz de Uruguay. Ambas síntesis fueron monitoreadas en el tiempo mediante la realización de espectros de absorción con la aparición de la banda correspondiente a la Resonancia de Plasmón de Superficie de las nanopartículas. Las nanopartículas fueron purificadas y caracterizadas por Microscopía Electrónica y Análisis Elemental (SEM, HR-TEM, EDS) y Microscopía Raman Confocal. Se evaluó su actividad antifúngica mediante determinación de concentración inhibitoria mínima frente a *Rhizoctonia oryzae sativa*, *Sclerotium oryzae* y *Pyricularia oryzae* (fitopatógenos de arroz) y *Fusarium graminearum* (fitopatógeno de trigo).

Los resultados obtenidos indicaron que todas las cepas evaluadas presentaron capacidad de sintetizar AgNPs. Las que produjeron mayor síntesis en menor tiempo fueron evaluadas para la síntesis de CuNPs. En general, las nanopartículas sintetizadas por distintas cepas presentaron forma esférica, baja polidispersidad, y diámetros promedios de 20-30 nm. Además presentaron actividad antifúngica por debajo de 0.50 nM frente a fitopatógenos de interés agrícola.

[1] Zhang D., Ma, X, Gu, Y., Huang, H., Zhang, G. (2020). Green Synthesis of Metallic Nanoparticles and Their Potential Applications to Treat Cancer. *Frontiers in Chemistry*, vol 8, article 799.

[2] Achari, G., & Kowshik, M. (2018). Recent Developments on Nanotechnology in Agriculture: Plant Mineral Nutrition, Health, and Interactions with Soil Microflora. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 66(33), 8647-8661.

[3] Sanguineto, P., Fratila, R., Estevez, M. B., Martínez de la Fuente, J., Grazú, V., & Alborés, S. (2018). Extracellular Biosynthesis of Silver Nanoparticles Using Fungi and Their Antibacterial Activity. *Nano Biomedicine and Engineering*, 10(2).

## Eletrodeposição de extrato de folhas *Eucalyptus Robusta* como inibidor orgânico de corrosão

Núbia Clasen Lourenço<sup>a</sup>, Augusto Santos do Nascimento<sup>a</sup>, Gabriel Almeida dos Santos<sup>a</sup>, Alice Gonçalves Osório<sup>a</sup>, Rubens Camaratta<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Pelotas, Gomes Carneiro 01- Porto-Pelotas  
gutosdn@hotmail.com

Atualmente, cerca de 30% da produção mundial de ferro e aço é perdida com a corrosão e os custos correspondem de 1 a 5% do PIB dos países [1]. Para mitigar esse grande problema, foram desenvolvidos inibidores de corrosão que são capazes de retardar ou inibir processo de corrosão. Esses inibidores agem na superfície do metal formando uma película protetora que serve de barreira entre a superfície do metálica e o meio corrosivo. Os inibidores convencionais podem ser agressivos ao meio ambiente, no entanto os inibidores orgânicos têm uma proposta ecologicamente mais amigável, são relativamente baratos e podem apresentar boa eficiência de inibição. Os extratos de plantas e alguns outros compostos orgânicos têm se mostrado promissores como fonte renovável, prontamente disponível e ambientalmente aceitável para atender à vasta gama de necessidades de inibidores de corrosão [2]. O filme formado pelos inibidores orgânicos age como uma barreira entre o metal e o ambiente ajudando assim a protegê-lo da corrosão [3]. Frequentemente, estes inibidores são adicionados a uma solução ácida, protegendo assim os metais quando estes entram são submersos nesta solução. No entanto neste trabalho busca-se, por meio de eletrodeposição, a utilização de um inibidor orgânico preparado a partir de folhas de eucalipto capaz de formar uma barreira de proteção antes da imersão do metal em solução ácida. Para isso, folhas de *Eucalyptus Robusta* foram utilizadas para, em um método simples, produzir um extrato contendo moléculas orgânicas com potencial de inibir a corrosão em aços. Com a utilização de uma fonte de corrente contínua, o extrato foi eletrodepositado em amostras de aço previamente preparadas variando-se 3 fatores: tensão (5V e 20V), polaridade (positiva e negativa) e tempo de eletrodeposição (5 e 30 minutos). Um quarto fator foi analisado referente à forma de utilização das amostras nos experimentos de corrosão, sendo que foi avaliada a secagem das amostras após a eletrodeposição (amostras secas) e o uso delas em seguida à eletrodeposição (amostras úmidas). Os experimentos de eletrodeposição foram planejados na forma de um projeto fatorial 2<sup>n</sup> e as amostras foram analisadas quanto ao seu potencial de redução em uma solução 1M de HCl utilizando eletrodo de prata como contra-eletrodo. Para comparação, foram analisadas amostras preparadas sem inibidor, e amostras preparadas com o extrato apenas depositado por imersão (sem aplicação de tensão).

A análise de variância ANOVA performada para os 4 fatores de eletrodeposição e considerando suas interações revelou que apenas os fatores tempo e carga possuem contribuição significativa ( $p < 0,05$ ) no resultado de potencial de redução das amostras eletrodepositadas. Todas as amostras que tiveram contato com o inibidor tiveram seu potencial de redução aumentado mostrando a efetividade do inibidor de corrosão. O processo de eletrodeposição com carga positiva e por 30 minutos se mostrou a forma mais efetiva de proteção.

[1] **BMS, BRASILMININGSITE**. Processo de corrosão faz com que 30% da produção mundial de ferro e aço seja desperdiçada.2020.

[2] Fakir, H. et al. Synthesis and evaluation of green corrosion inhibitor from rice husk to mitigate corrosion of carbon steel in NaCl environment: Science Direct, 2022.

[3] Verma, C. et al. Aqueous phase environmental friendly organic corrosion inhibitors derived from one step multicomponent reactions: a review. *Journal of Molecular Liquids*, 2019.

## Estudo da estabilidade térmica de filmes de PEAD/PANI

Kaique de Sotti Silva<sup>a</sup>, Marielle Bastos<sup>a</sup>, Alana Fernandes Golin<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal da Integração Latino-Americana - Foz do Iguaçu/PR - Brasil  
ks.silva.2019@aluno.unila.edu.br

Os polímeros são materiais essenciais para a manutenção do mundo atual. Eles são aplicados em diversos tipos de materiais e equipamentos utilizados no cotidiano, desde em embalagens até em dispositivos eletrônicos. Nesta pesquisa, o objetivo foi investigar o comportamento de filmes de polianilina (PANI) - um polímero semicondutor - em substrato de polietileno de alta densidade (PEAD) - polímero impermeável, com resistência mecânica e à abrasão - sob diferentes temperaturas de modo a verificar se possui estabilidade térmica para ser aplicado em dispositivos eletrônicos. Os filmes de PEAD/PANI foram fabricados a partir da polimerização *in situ* da PANI em substratos flexíveis formado por fibras puras de PEAD [1] e em seguida três filmes foram deixados em estufa por 24 horas com a temperatura mantida em 30°C, 40°C e 50°C. Antes e depois dos procedimentos térmicos, os filmes foram pesados em balança de precisão e analisados morfológicamente por meio de microscopia óptica. Foi observado que os filmes submetidos a 30°C e 40°C mantiveram suas características físicas e morfológicas, ou seja, não houve alteração na massa, dimensão, aparência e conformação das amostras. No filme submetido a 50°C a massa também se manteve constante, entretanto, houve alteração na morfologia das fibras do substrato, regiões em que a PANI teve sua coloração alterada de verde para azul e variação na conformação da amostra devido à contração de suas extremidades que, conseqüentemente, reduziu cerca de 30,8% de sua área inicial. A partir desses resultados foi constatado que filmes de PEAD/PANI são estáveis em temperaturas na faixa de 30°C e 40°C. Em temperatura de 50°C, o filme não é estável, pois, além do substrato de PEAD não possuir estabilidade dimensional e morfológica, a PANI não possui estabilidade elétrica, já que nessa temperatura ocorreu sua desdopagem, isto é, a PANI inicialmente semicondutora, com cor verde característica de quando está no estado sal de esmeraldina (dopada), passa a ter regiões isolantes, com cor azul característica de quando está no estado base esmeraldina (desdopada) [1]. No âmbito da eletrônica orgânica, ainda foi possível concluir que o filme PEAD/PANI tem potencial para aplicações em dispositivos eletrônicos orgânicos, desde que a temperatura de trabalho seja inferior a 50°C para que suas funcionalidades e tempo de vida sejam mantidos conforme esperado.

[1] A.F. Golin, Estudo das propriedades elétricas de filmes finos de PANI em substrato flexível de PEAD sob deformação mecânica, Tese, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2019.

[2] M.A. de Paoli, Degradação e Estabilização de Polímeros, 2ra ed., Chemkeys, 2008.

## **Fabricación de Pintura en Unidad del INR**

Maria M. Tor Varela

*Departamento de Arquitectura del INR, Cerro Largo 823*

magdator@gmail.com

Debido a las necesidades de la institución en la búsqueda de economizar el acceso a materiales de construcción, y generar convenios laborales con las PPL (personas privadas de libertad), se retoma un proyecto iniciado en otras administraciones, la fabricación de pintura realizada por las PPL, a cargo del Polo Logístico de la Unidad N°4 (ex COMCAR), que se encarga de obras nuevas y de mantenimiento para varias Unidades, el mismo es supervisado y administrado por miembros pertenecientes a la escala de policía ejecutivo, e integrado en el área operativa por PPLs, los cuales en su mayoría no tienen amplios conocimientos en los oficios de la construcción.

Para poder llevar a cabo el proyecto de fabricación de pintura, se busca asesoramiento con una empresa del rubro que a su vez es proveedor de los componentes químicos, CATER S.A. (Acrimax), esta empresa brinda una formulación, los materiales para realizarla y supervisa el procedimiento hasta encontrar la pintura que cumpla con criterios de calidad, (poder cubritivo, viscosidad, cohesión). Una vez comprobado el producto, se pasa a producir sin supervisión de profesional idóneo, así como se abre la compra de los componentes a diversos proveedores, no necesariamente especializados en el rubro de productos químicos.

La fabricación de la pintura realizada por los PPLs (personas privadas de libertad), tuvo como primera medida generar una producción continua en el tiempo, brindando a las unidades la cantidad que se disponía. Sin embargo, con el cambio de autoridades, se requirió aumentar la producción, alterando el sistema ya establecido.

La maquinaria e instrumental utilizado es precario, los componentes químicos se colocan en botellas de plástico (PET de diversas marcas de bebidas), con la indicación en la botella de la medida necesaria para la mezcla. Para la agitación de los componentes se decidió utilizar como contenedor un tacho de plástico, como mezcladora un motor adaptado de otra maquinaria y un tacho de plástico elevado que contiene el agua para la composición.

Todos estos factores generan que en la actualidad la pintura presenta diversas patologías (poco poder cubritivo, partículas no disueltas, etc.), elementos sólidos que no llegan a disolverse, por lo que se resuelve alterar la fabricación generando una pintura sin grumos, pero que no cumple con una calidad mínima. Por lo que se realiza una investigación (entrevistando y buscando documentación), formulación, procedimiento, materiales empleados, capacitación del personal interviniente a fin de determinar cuales son los procesos o componentes que están fallando; y presentar una alternativa para corregirlos.



## Optimización de síntesis de nanopartículas de semiconductores de Bismuto

Martina Viera \*<sup>a</sup>, Ivana Aguiar<sup>a</sup>, Álvaro Olivera<sup>b</sup>, Maia Mombrú Frutos<sup>a</sup>

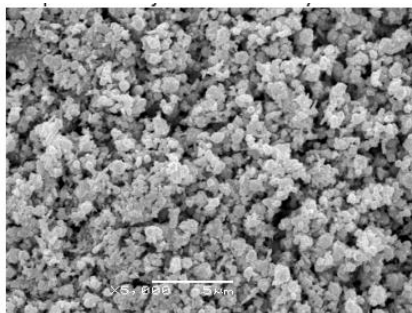
<sup>a</sup> Grupo de Desarrollo de Materiales y Estudios Ambientales, Área Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, Gral Flores 2124, 11800, Montevideo, Uruguay.

<sup>b</sup> Grupo de Desarrollo de Materiales y Estudios Ambientales, Departamento de Desarrollo Tecnológico, CURE,

Universidad de la República, Ruta nacional N°9 intersección con ruta N°15, Rocha, Uruguay.

\* martinaviera27@gmail.com

Los semiconductores basados en bismuto son estudiados dado que presentan potencial para aplicaciones en fotocatalisis, en detectores de radiación, y también para su inclusión en celdas solares[1]. Particularmente en este trabajo se busca sintetizar y caracterizar nanopartículas de Bi<sub>19</sub>S<sub>27</sub>I<sub>3</sub> en presencia de PEG como capping agent. A pesar de que los pocos estudios publicados son prometedores, aún falta literatura sobre este compuesto por lo que es de interés a partir de este trabajo, lograr enriquecer la información sobre el Bi<sub>19</sub>S<sub>27</sub>I<sub>3</sub>. Las nanopartículas se obtienen por el método hot injection en solución acuosa. La determinación de la morfología y del tamaño de partícula se realiza por microscopía electrónica de transmisión y microscopía electrónica de barrido. El análisis de la composición de las nanopartículas se obtiene mediante espectroscopia de dispersión de energía. Se identifica la fase cristalina mediante difracción de rayos X de polvo. Para verificar la presencia del capping agent se realiza espectroscopía FT-IR. El band-gap correspondiente se halla a partir de medidas por espectroscopía UV-vis de reflectancia difusa. En un principio, el diseño experimental se realizó en base a fijar la temperatura de trabajo, la relación de la concentración Bi:PEG 1:2 y variar dos parámetros: el tiempo de reacción y la concentración del precursor de yoduro. Estos experimentos resultaron en la aparición de dos morfologías y en la confirmación de la presencia de la fase cristalina de Bi<sub>19</sub>S<sub>27</sub>I<sub>3</sub>. A partir de lo observado en TEM y SEM se constató la presencia mayoritariamente de partículas redondeadas con un diámetro entre 499 y 752 nm y nanovarillas, como se observa en la Fig 1. En base a los espectros FT-IR obtenidos se confirmó la unión del capping agent a las nanopartículas. El valor de band gap se encuentra entre 1,48 y 1,70 eV. Cuando el parámetro que cambia es el tiempo de reacción (1 min, 5 min y 4,5hs) a medida que aumenta se observa en los difractogramas que los picos presentan una mayor definición, concluyendo en un aumento en la fase cristalina de las nanopartículas. Lo presentado son resultados preliminares, y se continúa trabajando en encontrar las condiciones óptimas para esta síntesis. Lo prometedor es la simplicidad del método, la utilización de precursores no tóxicos, y al realizarse en solución acuosa la temperatura de trabajo es baja lo que en conjunto contribuye con la divulgación de la química verde.



**Figura 1.** Imagen obtenida por SEM donde se observa la presencia de dos morfologías.

[1] Wu, Y., Zhou, B., Yang, C., Zhou, X., & Zhang, W. H. (2017). *Chemical Communications*, 53(39), 5445-5448.

## Experimento factorial para la optimización de los parámetros de fabricación de películas delgadas de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$

Carla Yelpo\*<sup>a</sup>, Sofía Favre<sup>a</sup>, Juliana Faux<sup>a</sup>, Daniel Ariosa<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República,  
Herrera y Reissig 565, CC 30, CP 11300 Montevideo, Uruguay

\* cyelpo@fing.edu.uy

Para realizar un análisis sistemático de las propiedades superconductoras, estructurales y vibracionales de películas delgadas de  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  ( $\text{Bi2212}$ ), es necesario poder fabricar muestras de buena calidad. Consideramos que una muestra es de buena calidad si presenta la fase correcta ( $\text{Bi2212}$ ) y es un buen superconductor (temperatura crítica próxima a 80 K y ancho de transición menor a 5 K).

Uno de los mejores métodos para la fabricación de películas delgadas es la deposición por láser pulsado (PLD) [1]. En esta técnica hay diversos parámetros (factores) que pueden ser controlados (temperatura, presión, frecuencia del láser, entre otros) y que afectan las características de las películas depositadas. Para conseguir muestras de buena calidad, estos parámetros deben ser optimizados.

Dentro de los métodos estadísticos de diseño experimental, el experimento factorial es particularmente útil en la optimización de procesos, principalmente en etapas iniciales donde se busca identificar los factores que más afectan la respuesta [2]. En el experimento factorial fraccional, varios factores son modificados en simultáneo de manera de maximizar la información sobre los efectos principales e interacciones de menor orden, requiriendo menos muestras que un experimento factorial completo.

En este trabajo mostraremos los resultados obtenidos al aplicar el experimento factorial fraccional para optimizar el crecimiento de películas delgadas de  $\text{Bi2212}$  mediante la técnica PLD, con dos geometrías de deposición diferentes (*off-axis* y *on-axis*). Para evaluar cada muestra analizaremos las propiedades estructurales (difracción de rayos X) y superconductoras (susceptibilidad AC en función de la temperatura). Consideraremos como respuestas la temperatura crítica y el ancho de la transición. Para cada geometría, presentaremos un modelo empírico que permite correlacionar los cambios en las propiedades superconductoras de las muestras con las condiciones de crecimiento utilizadas.

[1] Eason, Robert, ed. Pulsed laser deposition of thin films: applications-led growth of functional materials. John Wiley & Sons, 2007.

[2] Montgomery, Douglas C. Design and analysis of experiments. John Wiley & Sons, 2017.

## PARTICIPANTES

Nombre	Filiación	Email	País
Abreu Ana	Facultad de Ingeniería, UdelaR	aabreu@fing.edu.uy	Uruguay
Acevedo Romina	Tierra Lab y Corporación protierra Chile. UPC BARCELONA	romina.a.oliva@gmail.com	Chile
Acosta Pablo	Facultad de Ingeniería - UdelaR	pablo.acosta@ces.edu.uy	Uruguay
Aguiar Ivana	Facultad de Química, UdelaR	iaguia@fq.edu.uy	Uruguay
Aguiar Sofía	Facultad de Ingeniería, UdelaR	saguia@fing.edu.uy	Uruguay
Alborés Silvana	Facultad de Química, UdelaR	salbores@fq.edu.uy	Uruguay
Almeida Gabriel	Universidade Federal de Pelotas	gabriel288868@gmail.com	Brasil
Amaral Julia	Universidade Federal De Pelotas	juliaguidodesign@gmail.com	Brasil
Amy Lucia	Facultad de Ingeniería, UdelaR	lamy@fing.edu.uy	Uruguay
Ariosa Daniel	Facultad de Ingeniería, UdelaR	dariosa@fing.edu.uy	Uruguay
Arispe Florencia	Facultad de Ciencias, UdelaR	farispe@fcien.edu.uy	Uruguay
Arizaga Livia	Facultad de Química, UdelaR	larizaga@fq.edu.uy	Uruguay
Arrarte Eloisa	Facultad de Química, UdelaR	earrarte@fq.edu.uy	Uruguay
Ávila Mauricio	Facultad de Ciencias, UdelaR	maniavila@gmail.com	Uruguay
Bastos Mariela	Universidade Federal da Integração Latino- Americana	m.bastos.2019@aluno.unila.edu. br	Brasil
Barboni Leonardo	Facultad de Ingeniería, UdelaR	lbarboni@fing.edu.uy	Uruguay
Barboza Celeste	Facultad de Arquitectura, UdelaR	arq.celestebarboza@gmail.com	Uruguay
Benavidez Edgardo	Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional San Nicolás	ebenavidez@frsn.utn.edu.ar	Argentina
Benzo Martín	CURE, UdelaR	martinbencast@gmail.com	Uruguay
Bitencourt Otávio	Universidade Federal de Pelotas	otaviopacheco2001@gmail.com	Brasil
Bomio Mauricio	Universidade Federal do Rio Grande do Norte	mauricio.bomio@ufrn.br	Brasil
Borges Franchescole	Universidade Federal de Pelotas	franchescole.cardoso@gmail.co m	Brasil
Botta Natalia	Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismos, UdelaR	estudiog2b@gmail.com	Uruguay
Brandaleze Elena	Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional San Nicolás	ebrandaleze@frsn.utn.edu.ar	Argentina
Brühl Sonia	Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Concepción del Uruguay y CONICET	sonia@frcu.utn.edu.ar	Argentina
Caribó Melina	Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismos, UdelaR	melina.cabiro1999@gmail.com	Uruguay
Cabrera Carina	Facultad de Ingeniería, UdelaR	carinacabrera0512@gmail.com	Uruguay
Calcagno Franco	Universidade Federal de Pelotas	fabio.riemke@gmail.com	Brasil
Caldeira Raphael	Universidade Federal de Pelotas	raphael.balboni@gmail.com	Brasil
Cardoso Mauricio	Facultad de Química, UdelaR	mcardoso@fq.edu.uy	Uruguay

Nombre	Filiación	Email	País
Carmona Anibal	Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Concepción del Uruguay.	carmonaa@frcu.utn.edu.ar	Argentina
Casco Miriam	Universidad Católica del Uruguay	mirian.casco@ucu.edu.uy	Uruguay
Cassetta Antonella	Facultad de Química, UdelaR	antocassetta@gmail.com	Uruguay
Castro Yanaina	Universidad Católica del Uruguay	yanainacastroc@gmail.com	Uruguay
Cebreiros Florencia	Facultad de Ingeniería, UdelaR	fcebreiros@fing.edu.uy	Uruguay
Chapetti Mirco	INTEMA, Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales	mchapetti@fi.mdp.edu.ar	Argentina
Costa Yan	UNILA - Universidade Federal da Integração Latino-Americana	yc.carneosso.2019@aluno.unila.edu.br	Brasil
Dadalto Ramon	Universidade Federal de Pelotas	ramondadaltocarvalho@gmail.com	Brasil
da Costa Érica	Universidade Federal de Pelotas	ericadacostacampos@gmail.com	Brasil
da Silva Sergio	Universidade Federal de Pelotas	sergiocava@gmail.com	Brasil
da Silva Gustavo	Universidade Federal de Pelotas	gustavodalenogare@gmail.com	Brasil
de Amores Ian	Facultad de Ingeniería, UdelaR	iandeamores@fing.edu.uy	Uruguay
de León Andrea	Facultad de Química, UdelaR	adeleon@fq.edu.uy	Uruguay
De Gouveia Renato	Universidade Federal de Pelotas	renatogouveia2@outlook.com	Brasil
De Sotti Kaique	Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA)	ks.silva.2019@aluno.unila.edu.br	Brasil
Doldán Mayra	Facultad de Ingeniería, UdelaR	mdoldan@fing.edu.uy	Uruguay
dos Reis Gian	Universidade Federal de Pelotas	gianpaganotto@gmail.com	Brasil
Duran Alicia	Instituto de cerámica y vidrio	aduran@icv.csic.es	España
Elizalde Valeria	Facultad de Química, UdelaR	velizalde@fcien.edu.uy	Uruguay
Esteves Martín	Facultad de Química, UdelaR	mesteves@fq.edu.uy	Uruguay
Esteves María	Facultad de Química, UdelaR	besteves@fq.edu.uy	Uruguay
Faccio Ricardo	Facultad de Química, UdelaR	erfaccio@fq.edu.uy	Uruguay
Faux Juliana	Facultad de Ingeniería, UdelaR	jfaux@fing.edu.uy	Uruguay
Favre Sofía	Facultad de Ingeniería, UdelaR	sfavre@fing.edu.uy	Uruguay
Fernandes Nicholas	Universidade Federal de Pelotas	nicholasfs97@gmail.com	Brasil
Fernandes Alana	Universidade Federal da Integracao Latino-Americana (UNILA)	alana.golin@unila.edu.br	Brasil
Fernandes Daiane	Universidade Federal de Pelotas	daiane.fg.eng@outlook.com	Brasil
Fernandez Luciana	Facultad de Química, UdelaR	lucianaf@fq.edu.uy	Uruguay
Folga Alejandro	Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismos, UdelaR	alfotocopias@gmila.com	Uruguay
Galain Isabel	Facultad de Química, UdelaR	isabelgalain@gmail.com	Uruguay
García Melody	Univesidad Tecnológica del Uruguay	melody.garcia@utec.edu.uy	Uruguay
Gau Daniel	Facultad de Ingeniería, UdelaR	dgau@fing.edu.uy	Uruguay
Göbel Viviane	Universidade Federal de Pelotas	vivianegobelmarques@gmail.com	Brasil
Gomes Amanda	Universidade Federal de Pelotas	amandagomes0205@gmail.com	Brasil
Gomez José	Facultad de Ingeniería, UdelaR	fgomez@fing.edu.uy	Uruguay

Nombre	Filiación	Email	País
Gonçalves Daniele	Universidade Federal de Pelotas	mesquitagdani@gmail.com	Brasil
Gregorio Tatiana	Facultad de Química, UdelaR	tatigregorio97@gmail.com	Uruguay
Guasamucare Rossannie	Facultad de Química, UdelaR	rossannie@fq.edu.uy	Uruguay
Herou Paula	Facultad de Ingeniería, UdelaR	paulaherou@gmail.com	Uruguay
Ibañez Marcela	Cenur Noreste, UdelaR	marcela.ibanez@cut.edu.uy	Uruguay
J. de Menezes Aparecido	Federal University of São Carlos – UFSCar	jrmenezes@ufscar.br	Brasil
Kurz Guilherme	Universidade Federal de Pelotas	g_maron@hotmail.com	Brasil
Kurz Thiago	Universidade Federal de Pelotas	thiagopedraa@outlook.com	Brasil
Lanzini Fernando	Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires	flanzini@ifimat.exa.unicen.edu.ar	Argentina
Lara Yamile	<i>Universidad de la República</i>	yamilelara@gmail.com	Uruguay
Lecot Nicole	Facultad de Ciencias, UdelaR	nlecot@fcien.edu.uy	Uruguay
Leite Edson	Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano)	edson.leite@Innano.cnpem.br	Brasil
Leite Inaiara	Universidade Federal de Pelotas	naiaraleite68@gmail.com	Brasil
Lemos Matheus	Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul	matheus.lima94@edu.pucrs.br	Brasil
Lenz Raisi	Universidad Tecnológica del Uruguay	raisi.lenz@utec.edu.uy	Uruguay
Liana Cátia	Universidade Federal de Pelotas	catiaucker@gmail.com	Brasil
Liguori Alberto	Facultad de Ingeniería, UdelaR	aliguori@fing.edu.uy	Uruguay
Maidana Camila	CURE, UdelaR	cami.mdls@gmail.com	Uruguay
Manke Tatiane	Universidade Federal de Pelotas	tatianemanke@hotmail.com	Brasil
Marotti Ricardo	Facultad de Ingeniería, UdelaR		Uruguay
Martinelli Branda	Universidade Federal de Pelotas	brendamartinelli@icloud.com	Brasil
Martinez Juan	Facultad de Ingeniería, UdelaR	jmartinez@fing.edu.uy	Uruguay
Mederos Matías	Facultad de Odontología, UdelaR	matiasmederos@odon.edu.uy	Uruguay
Minghini Lucas	Universidade Federal de Pelotas	lucasmingon@gmail.com	Brasil
Mogni Liliana	Centro Atómico Bariloche. Instituto Balseiro	lilianamogni@gmail.com	Argentina
Molina Anyela	Facultad de Ingeniería, UdelaR	amolina@fing.edu.uy	Uruguay
Molina Nicolás	Facultad de Ingeniería, UdelaR	nv.molinat@gmail.com	Uruguay
Mombru Dominique	Facultad de Química, UdelaR	dmombru@fq.edu.uy	Uruguay
Mombru Maia	Facultad de Química, UdelaR	maiam@fq.edu.uy	Uruguay
Monks Victoria	Universidade Federal de Pelotas	vi.monks@gmail.com	Brasil
Montagni Tatiana	Facultad de Ciencias, UdelaR	tmontagni@fcien.edu.uy	Uruguay
Montenegro Benjamín	Facultad de Química, UdelaR	montenegro@fq.edu.uy	Uruguay
Moreira Mario	Universidade Federal de Pelotas	mlucio3001@gmail.com	Brasil
Moreno Ariel	Facultad de Ciencias, UdelaR	moreno@fisica.edu.uy	Uruguay

Nombre	Filiación	Email	País
Moresco Amanda	Universidade de Caxias do Sul	amoresco3@ucs.br	Brasil
Musso Mauricio	Facultad de Química, UdelaR	mmusso@fq.edu.uy	Uruguay
Nolasco Maicon	Universidade Federal de Pelotas	maiconpedrotti@gmail.com	Brasil
Noguera Analía	CURE, UdelaR	anoguera@cure.edu.uy	Uruguay
Ohanian Mauricio	Facultad de Ingeniería, UdelaR	mauricio.ohanian@gmail.com	Uruguay
Olivera Melisa	Facultad de Química, UdelaR	molivera@fq.edu.uy	Uruguay
Olivera Elisa	Universidade Federal de Rio Grande Do Sur	elisa.magno@ufrgs.br	Brasil
Omizzollo Daiane	Universidade de Caxias do Sul	donegri@ucs.br	Brasil
Palombo Viviana	Facultad de Ingeniería, UdelaR	vpalombo@fing.edu.uy	Uruguay
Papaleó Ricardo	Pontificia Universidade Católica do Rio Grande do Sul	papaleo@pucrs.br	Brasil
Pellegrini Nora	CONICET/UNR	pellegrini@ifir-conicet.gov.ar	Argentina
Pardo Helena	Facultad de Química, UdelaR	hpardo@fq.edu.uy	Uruguay
Pérez Andrés	CURE, UdelaR	aperez@cure.edu.uy	Uruguay
Pérez Camila	Facultad de Química, UdelaR	camila241099@icloud.com	Uruguay
Pérez María Eugenia	CURE, UdelaR	totyperez@gmail.com	Uruguay
Pereyra Javier	Facultad de Ingeniería, UdelaR	jpereyra@fing.edu.uy	Uruguay
Pereira Richard	Universidad Tecnológica del Uruguay	richard.pereira@utec.edu.uy	Uruguay
Pereira Vinicius	Universidade Federal de Pelotas	viniciusdiassvp@gmail.com	Brasil
Picco Camila	INCAPE CONICET/ UNL	cami.picco38@gmail.com	Argentina
Pignelli Fernando	Facultad de Química, UdelaR	fpignanelli@fq.edu.uy	Uruguay
Pina Ana	Facultad de Química, UdelaR	acpina@fq.edu.uy	Uruguay
Pons Santiago	Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismos, UdelaR	arq.santiagopons@gmail.com	Uruguay
Portugau Patrice	Facultad de Química, UdelaR	portugau@fq.edu.uy	Uruguay
Ramirez Matías	Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional San Nicolás	maramirez@frsn.utn.edu.ar	Argentina
Ribeiro Caue	Pesquisa Agropecuária (Embrapa)	caue.ribeiro@embrapa.br	Brasil
Ribeiro Luiza	Universidade Federal de Pelotas	luizasantanari@gmail.com	Brasil
Rocha Andressa	Universidade de Caxias do Sul	arbystronski@ucs.br	Brasil
Rodrigues Felipe	Universidade Federal de Pelotas	cassoni_felipe@yahoo.com	Brasil
Rodríguez Benigno	Facultad de Ingeniería, UdelaR	benigno@fing.edu.uy	Uruguay
Rodríguez Claudia	Facultad de Química, UdelaR	cclaudiarg@fq.edu.uy	Uruguay
Rodríguez Iliana	Facultad de Ingeniería, UdelaR	irodriguez@fing.edu.uy	Uruguay
Romero Mariano	Facultad de Química, UdelaR	mromero@fq.edu.uy	Uruguay
Roth Guillermo	Facultad de Química, UdelaR	groth@fq.edu.uy	Uruguay
Sánchez Sabrina	Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismos, UdelaR	msabrinasanchez@gmail.com	Uruguay
Sandoval Félix	Escuela Técnica Superior de Arquitectura, Universidad de Valladolid	fjove@arq.uva.es	España
Sanguinero Paula	Facultad de Química, UdelaR	paulasd@fq.edu.uy	Uruguay

Nombre	Filiación	Email	País
Santomauro Roberto	Sobresaliente	tenso@sobresaliente.com	Uruguay
Santos Augusto	Universidade Federal de Pelotas	gutosdn@hotmail.com	Brasil
San Martins Franciele	Universidade Federal de Pelotas	francielensmr2@hotmail.com	Brasil
Scagni Yamila	Facultad de Química, UdelaR	scagniyamila@gmail.com	Uruguay
Segovia Lorena	Facultad de Ingeniería, UdelaR	lsegovia@fing.edu.uy	Uruguay
Seiler Santiago	Facultad de Ingeniería, UdelaR	sseiler@fing.edu.uy	Uruguay
Silva Mariana	Facultad de Ingeniería, UdelaR	msilva@fing.edu.uy	Uruguay
Spera Enzo	Facultad de Ingeniería, UdelaR	espera@fing.edu.uy	Uruguay
Staneck Juan	Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires	jstaneck@ifimat.exa.unicen.edu.ar	Argentina
Tomey Elisa	Facultad de Ingeniería, UdelaR	elisatomey@gmail.com	Uruguay
Tor María	Instituto Nacional de Rehabilitación	magdator@gmail.com	Uruguay
Torres Martín	Facultad de Química, UdelaR	mtobru@fq.edu.uy	Uruguay
Torrano Antonella	Facultad de Química, UdelaR	Antooto21@gmail.com	Uruguay
Tranquilin Ricardo	University Anhanguera São Paulo	ricardotranquilin@gmail.com	Brasil
Vacca Marcio	Facultad de Ingeniería, UdelaR	mvacca@fing.edu.uy	Uruguay
Valente Cristhiane	Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul (PUCRS)	avalente.cris@gmail.com	Brasil
Valente Paulo	Facultad de Ingeniería, UdelaR	pvalente@fing.edu.uy	Uruguay
Varela Alma	Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismos, UdelaR	arq.almavarela@gmail.com	Uruguay
Vasquez Nohelly	Universidad de la República	noheilly@gmail.com	Uruguay
Veiga Santiago	Facultad de Química, UdelaR	sveiga@fq.edu.uy	Uruguay
Vera Joelis	Universidad de La Frontera	j.vera12@ufromail.cl	Chile
Viera Martina	Facultad de Química, UdelaR	martinaviera27@gmail.com	Uruguay
Wienke Cristiane	Universidade Federal de Pelotas	craubach.iqg@ufpel.edu.br	Brasil
Yelpo Carla	Facultad de Ingeniería, UdelaR	cyelpo@fing.edu.uy	Uruguay