

# CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO Informe Científico<sup>1</sup>

PERIODO <sup>2</sup>: 2013-2014

Legajo N°:

## 1. DATOS PERSONALES

*APELLIDO: VICENTE*

*NOMBRES: JOSE LUIS*

*Dirección Particular: Calle: N°:*

*Localidad: La Plata CP: 1900 Tel:*

*Dirección electrónica (donde desea recibir información): vicente@inifta.unlp.edu.ar*

## 2. TEMA DE INVESTIGACION

DESARROLLO DE MODELOS TEORICOS DE INTERES FISICOQUIMICO

Los objetivos del Plan de Trabajo están encaminados a describir diferentes interfases, mediante la formulación de modelos tratados dentro del formalismo de la Mecánica Cuántica o la Mecánica Estadística.

La información que proporcionan las actuales técnicas experimentales requiere un análisis a escala atómica y, por lo tanto, toda descripción que se pretenda hacer de una interfase debe formularse a nivel microscópico, tratando complementariamente resultados experimentales y teóricos lo mas elaborados posibles. Desarrollar modelos teóricos que describan diferentes propiedades de la Naturaleza, no solo ayuda a interpretar la información experimental, a los efectos de dar una respuesta acabada a los interrogantes planteados, sino que a la vez contribuye significativamente a programar racionalmente experimentos futuros.

Como consecuencia que el Plan de Trabajo propuesto esta encaminado a interpretar el rol que la presencia de una superficie tiene sobre las propiedades fisicoquímicas de un sistema, las áreas de interés tecnológico hacia las cuales se dirigen los esfuerzos son:

- a) Adsorción de contaminantes líquidos y procesos electroquímicos. (Interfases sólido-solución)
- b) Adsorción de gases, Nuevos materiales. (Interfases sólido – gas)
- c) Catálisis Heterogénea, Cinética en superficies (Interfaces alejadas del equilibrio).

## 3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

*INGRESO: Categoría: Asistente Fecha: Agosto 1987*

*ACTUAL: Categoría: Principal desde fecha: Noviembre 2009*

## 4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

<sup>1</sup> Art. 11; Inc. "e"; Ley 9688 (Carrera del Investigador Científico y Tecnológico).

<sup>2</sup> El informe deberá referenciar a años calendarios completos. Ej.: en el año 2008 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2006 al 31-12-2007, para las presentaciones bianuales.

*Universidad y/o Centro: Universidad Nacional de La Plata - INIFTA*

*Facultad: Ciencias Exactas*

*Departamento: Química*

*Cátedra:*

*Otros:*

*Dirección: Calle: 64 y diag. 113 N°:*

*Localidad: La Plata CP: 1900 Tel: 4257297, 425743*

*Cargo que ocupa: Investigador Principal - Consejero Directivo*

**5. DIRECTOR DE TRABAJOS.** (En el caso que corresponda)

*Apellido y Nombres:*

*Dirección Particular: Calle: N°:*

*Localidad: CP: Tel:*

*Dirección electrónica:*

.....

Firma del Director (si corresponde)

.....

Firma del Investigador

**6. EXPOSICION SINTETICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO.**

*Debe exponerse, en no más de una página, la orientación impuesta a los trabajos, técnicas y métodos empleados, principales resultados obtenidos y dificultades encontradas en el plano científico y material. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

La síntesis en las tres áreas de interés tecnológico es:

a) Adsorción de contaminantes líquidos, Procesos electroquímicos – (Interfases sólido – solución)

Uno de los contaminantes orgánicos más peligrosos son los hidrocarburos biorrefractarios, no biodegradables, de bajo peso molecular y baja volatilidad, por lo que generan mayor preocupación en el tratamiento de potabilización del agua. El fenol y sus derivados constituyen un claro ejemplo. Los compuestos biorrefractarios no pueden ser eliminados por tratamientos biológicos y se debe recurrir al ataque químico, muy eficaz, aunque muchas veces sus residuos resultan mas peligrosos que los compuestos originales. Por esto se prefieren los métodos físicos de eliminación, siendo el de adsorción física y/o química el más utilizado y mejor conocida. Por todo esto es que resulta de gran interés dentro de los estudios de interfases sólido-solución, aquellas que involucran la adsorción física y/o química de compuestos fenólicos y sus derivados. Actualmente se está realizando una Tesis Doctoral en la UNL [1] sobre esta temática. Se han caracterizado dos carbones activados [2] que luego se emplearon en la adsorción de fenol [3] y se ha realizado un estudio sistemático de los distintos factores que afectan la adsorción: sustrato, grupos superficiales y solvente [4]. Los modelos desarrollados para describir los carbones activados también se emplearon para estudiar la separación de gases de efecto invernadero [5].

Los estudios realizados o en vías de realización han generado interacción y transferencia de resultados con otros grupos de investigación, tanto nacionales como del exterior, son:

i) Grupos en el exterior: Prof. Dr. L.Blum, University of Puerto Rico, EEUU

ii) Grupos en el País:

Prof. Dr. H.Odetti, Fac. de Bioq. y Farmacia, Universidad del Litoral.

b) Adsorción de gases, Nuevos Materiales – (Interfases sólido – gas )

Los mayores triunfos de la ciencia en el último siglo se debieron al desarrollo de técnicas capaces de estudiar el tamaño y forma de los objetos a niveles moleculares y atómicos. Esto permitió comprender la forma en que interactúan átomos y moléculas y abrió las puertas al “diseño”, a estas escalas, de nuevos materiales, dando origen al nacimiento de las llamadas nanotecnologías. Una de las formas de describir a nivel molecular las interfases gas –sólido, es a través de la adsorción desde sólidos porosos, superficies fractales y nanotubos de carbono. En esta área se presentó en 2011 una Tesis Doctoral [6] que analiza diferentes nanoestructuras y su capacidad para adsorber gases de importancia energética y tecnológica, como el caso del CH<sub>4</sub> y CO. En dicha Tesis se estudia experimental y teóricamente la adsorción sobre nanotubos de carbón (NT) de pared simple, así como el efecto de distintos tratamientos sobre NT de paredes múltiples [7]. Simultáneamente se estudió la separación de mezclas de gases sobre distintas estructuras de carbon [5,8].

La interacción y transferencia de resultados con grupos de investigación en esta área es:

i) Grupos del exterior:

Prof. Dr. J.M.Tascón, Instituto Nacional del Carbón, Oviedo, España.

Prof. Dr. A.Migone, Physics Dept, Suthern Illinois University, EEUU.

ii) Grupos en el País: Prof. Dr. E.A.Castro, Universidad de La Plata

c) Catálisis Heterogénea, Cinética en superficies – (Interfases alejadas del equilibrio).

Dentro del trabajo de Tesis Doctoral del Dr. M.Rafti [9], se estudió la cinética de las reacciones de NH<sub>3</sub>+O<sub>2</sub> y NH<sub>3</sub>+NO sobre superficies de Pt(100). Se continuó trabajando en esta línea, para lo cual el Dr. Rafti viajó durante 2010 a al Instituto de Físicoquímica y Electroquímica de la Universidad de Hannover, Alemania, a desarrollar una serie de mediciones experimentales bajo supervisión del Prof. Dr. R.Imbhl, en el marco de un desarrollo de investigación conjunta contemplado en el Proyecto 11/ X596, patrocinado por la UNLP. En esta oportunidad se estudio la detección de sincronizaciones espacio – temporales en la reacción de NO + NH<sub>3</sub> sobre Pt policristalino [10].

Algunos de los modelos empleados se han discutido con el Prof. H.Huecker de la Universidad de Oldenburg, Alemania durante la estadía del Dr. Rafti en aquel país y otros se analizan con el Profesor J.R.Roche de la Universidad de Nancy, Francia.

La interacción con grupos experimentales en esta área es:

i) Grupos en el exterior: Prof. Dr. R.Imbhl, Universitaet Hannover, Alemania

Prof. Dr. H.Huecker, Universitaet Oldenburg, Alemania

Prof. Dr. J.R.Roche, Universite Henri Poincare, Francia

ii) Grupos en el País: Prof. Dr. A.J.Arvia, INIFTA, Universidad Nacional de La Plata

## REFERENCIAS

[1] “Estudio de la adsorción de compuestos biorrefractarios sobre soluciones acuosas”

P.Húmpola, Tesis Doctoral (2013)

Universidad Nacional del Litoral. Calificación: Sobresaliente (10)

[2] “Description of Different Solid Adsorbent Surfaces: Adsorption Mechanisms Based on a Sequential Decomposition of Isotherms”.

P. D. Húmpola, H. S. Odetti; E. S. E. Flores; and J. L. Vicente.

Surface Review and Letters. 20 (2013) 1350022-1.

[3] “Thermodynamic analysis of adsorption of phenol in liquid phase on different activated carbons”.

P.D. Húmpola; H.S. Odetti; A.E. Fertitta; J.L. Vicente.

J. Chil. Chem. Soc. 58 (2013) 1541.

- [4] "Adsorption of phenols from different solvents on graphene. Semiempirical quantum mechanical calculations".  
P.D. Húmpola; H.S. Odetti; A.G. Albesa; and J.L. Vicente.  
Adsorption Science & Technology. 31 (2013) 359.
- [5] "Adsorption of CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> Mixtures in a Molecular Model of Activated Carbon through Monte Carlo Simulations".  
A.G. Albesa; M. Rafti; J.L. Vicente; H. Sanchez; P.D. Húmpola.  
Adsorption Science & Technology. 30 (2013) 669.
- [6] "Estudio de la adsorción de gases en nanoestructuras de carbón"  
A.G. Albesa, Tesis Doctoral (2011)  
Universidad Nacional de La Plata. Calificación: Sobresaliente (10)
- [7] "Methane Adsorption Over Highly Defective Multiwalled Carbon Nanotubes: Monte Carlo Simulations".  
A.G. Albesa; M. Rafti; J.L. Vicente.  
J. of Surfaces and Interfaces of Materials. 1 (2013) 43.
- [8] "Experimentos sobre la inversion de selectividad para etapas tempranas en la adsorción de mezclas Ar-CH<sub>4</sub> sobre grafito exfoliado".  
M. Rafti; A.G. Albesa; A.D. Migone; J.L. Vicentell  
Simposio sobre adsorción, adsorbentes y sus aplicaciones. 20-22/02/2013. San Luis
- [9] "Estudio de estructuras disipativas en catálisis heterogénea"  
M. Rafti, Tesis Doctoral (2007).  
Universidad Nacional de La Plata. Calificación: Sobresaliente (10)
- [10] "NO + NH<sub>3</sub> reaction over polycrystalline Pt: Numerical analysis of spatio-temporal data and evidence of non linear behavior".  
M. Rafti; A.G. Albesa; and J. L. Vicente.  
Chemical Physics. 415 (2013) 56.

## 7. TRABAJOS DE INVESTIGACION REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERIODO.

**7.1 PUBLICACIONES.** *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellas publicaciones en las que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha mención no debe ser adjuntada porque no será tomada en consideración. A cada publicación, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden que figuran en ella, lugar donde fue publicada, volumen, página y año. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparece en la publicación. La copia en papel de cada publicación se presentará por separado. Para cada publicación, el investigador deberá, además, aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del trabajo y, para aquellas en las que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación.*

- [1] "Description of Different Solid Adsorbent Surfaces: Adsorption Mechanisms Based on a Sequential Decomposition of Isotherms".  
P.D. Húmpola, H.S. Odetti; E.S.E. Flores; and J.L. Vicente.  
Surface Review and Letters: 20 (2013) 1350022-1.  
Código ISSN : 0218-625X

### Abstract

In this paper some of the usual methods employed to describe solid surfaces, from measurements of gas adsorption, are questioned. We begin discussing, from its historical development, the general equation which today has been incorporated to many of the lab equipments. We chose this type of approach because most of the problems have arose from the evolution of this equation over years. We also propose a description that takes into account the different adsorption processes occurring as the pressure increases. Both aspects (revisions and proposal) are

highlighted in the description of adsorption of gases on various solid substrates, both homogeneous and heterogeneous. Our proposal starts at low pressures, where there are either 2D multilayer adsorptions (through Langmuir-Fowler-Guggenheim mechanisms) or 3D micropore filling (described by Polanyi-Dubinin), depending on whether homogeneous or heterogeneous substrates are, respectively. For intermediate pressures we make a critical analysis of the results, since, having a rough surface, does not necessarily mean being in the presence of fractal behavior. Finally, the high-pressure region is described by relating gas condensation to the degree of heterogeneity of the substrate and to the interaction between the adsorbed molecules, and this is done either using generalizations of the BET proposal or the mechanisms presented by Aranovich and others.

[2] "Thermodynamic analysis of adsorption of phenol in liquid phase on different activated carbons".

P.D. Húmpola; H.S. Odetti; A.E. Fertitta; J.L. Vicente.

J. Chil. Chem. Soc. 58 (2013) 1541.

Código ISSN : 0717-9307

#### Abstract

This paper studies the thermodynamic aspects of the processes of adsorption of phenol from dilute aqueous solutions on different commercial carbons, evaluating how to optimize the removal of this persistent contaminant. Two powdered activated carbons from two different companies were used: Tetrahedron Carbon (Andes Chemistry Lab., Mendoza, Argentina), and Norit (Norit Americas Inc., USA). Both specific surface areas were measured by means of the BET method. The adsorbate was high purity solid phenol (Fluka ®  $\geq 99.5\%$ ). Experimental isotherms were determined at 293 K, 303 K and 313 K. The Freundlich and Sips theoretical models were used to fit the experimental data. Freundlich isotherm slightly diverges with the experimental results for higher equilibrium concentrations. Thermodynamic parameters were calculated and correlated with the adsorption behaviours. The values of the thermodynamic parameters obtained indicate an exothermic and spontaneous process for both carbons, and mainly for Norit. This is due to the fact that there might be chemically activated regions on the surface of the Norit carbon, which give rise to combined mechanisms of physisorption and chemisorption.

[3] "Adsorption of phenols from different solvents on graphene. Semi empirical quantum mechanical calculations".

P.D. Húmpola; H.S. Odetti; A.G. Albesa; and J.L. Vicente.

Adsorption Science & Technology: 31 (2012) 359-365.

Código ISSN : 0263-6174

#### Abstract

The description of the adsorption of phenol from aqueous solutions on carbon surfaces is discussed from different theoretical points of view, such as Monte Carlo simulations, semi empirical calculations, density functional theory (DFT), and molecular dynamics. We perform a quantitative analysis of the adsorption of aromatics in general, and phenolic compounds in particular, through semi empirical quantum mechanical calculations employing different approaches. Our results raise doubts that phenol is primarily adsorbed in flat position on the graphene layers, and consequently that the adsorption forces are controlled by pi-pi dispersion interactions between the aromatic ring of phenol and the graphene layer structure. Based on quantum mechanical calculations, carried out through various approaches, we conclude that neither surface oxidation nor the presence of a polarizable solvent is consistent with the claim that pi-pi interactions are dominant in the adsorption of phenolic compounds on graphite.

[4] "Methane Adsorption Over Highly Defective Multiwalled Carbon Nanotubes: Monte Carlo Simulations".

A.G. Albesa; M. Rafti; J.L. Vicente.  
J. of Surfaces and Interfaces of Materials. 1 (2013) 43-48.  
Código ISSN : 2164-7542

Abstract:

Methane adsorption isotherms and isosteric heat of adsorption on a number of modified double wall carbon nanotubes probe structures were obtained by Monte Carlo simulations. This analysis is used to mimic the influence of oxidation treatment on adsorption properties of such carbon structures. We found that microscopic heterogeneity can be in principle observed via macroscopic measurements such as, isosteric heat determinations, and the wetting behavior of methane on carbon nanotubes.

[5] "NO + NH<sub>3</sub> reaction over polycrystalline Pt: Numerical analysis of spatio-temporal data and evidence of non linear behavior".

M. Rafti; A.G. Albesa; and J. L. Vicente.  
Chemical Physics: 415 (2013) 56-62.  
Código ISSN : 0301-0104

Abstract

Surface catalytic reactions display under low pressure conditions non-linear features such as non-stationary reaction rates and spatio-temporal patterns known as dissipative structures. We analyze experimental data from ammonia oxidation reaction over polycrystalline platinum catalyst using quantitative and qualitative nonlinearity tests, such as the Grassberger-Procaccia (GP) algorithm and Surrogate Time Series. In order to perform such analysis, local and global time series were extracted from both spatially resolved and global measurements. Additionally, evidence confirming previously, proposed mechanism for reaction system.

**7.2 TRABAJOS EN PRENSA Y/O ACEPTADOS PARA SU PUBLICACIÓN.** *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellos trabajos en los que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Todo trabajo donde no figure dicha mención no debe ser adjuntado porque no será tomado en consideración. A cada trabajo, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden en que figurarán en la publicación y el lugar donde será publicado. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparecerá en la publicación. La versión completa de cada trabajo se presentará en papel, por separado, juntamente con la constancia de aceptación. En cada trabajo, el investigador deberá aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del mismo y, para aquellos en los que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación.*

**7.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION.** *Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo, indicando el lugar al que han sido enviados. Adjuntar copia de los manuscritos.*

**7.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION.** *Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo.*

[1] "Description of Multy-walled Carbon Nanotubes through sequential decomposition of the adsorption mMechanisms".

A.G. Albesa; M. Rafti; and J.L. Vicente.  
Surface Review and Letters:  
Código ISSN : 0218-625X

Abstract

The effect of wet acid oxidation by means of sulfuric/nitric mixtures, and high temperature treatment of commercial arc discharge synthesized multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) was studied. In order to analyze the adsorption capacities of different MWNTs, we employ a multistep method to separately study isotherms at different pressure ranges (zones). The method is based on simple gas isotherm measurements (N<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub>). Low pressures range can be described using Dubinins model, while high pressure regime was fitted using different models such as BET multilayer and Freundlich equations. This analysis allows elucidate how different treatments (chemical and thermal) affect the interactions between admolecules and the MWCNT substrate; and between the adsorbed molecules. If description of the adsorption of simple gases such as methane and N<sub>2</sub> on complex substrates, such as MWNTs, is carried using only one approach; e.g., Dubinins model, which is limited to the narrow range of nanotubes among the size distribution necessarily existing in a commercial MWCNT sample, the results obtained would be very biased. The results hereby presented show also that, while MWNTs are a promising material for storage applications(methane), gas separation applications should carefully consider the effect of wide nanotube size distribution present. sizes of tubes distributions detected.

**7.5 COMUNICACIONES.** *Incluir únicamente un listado y acompañar copia en papel de cada una. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores).*

**7.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS.** *Incluir un listado y acompañar copia en papel de cada uno o referencia de la labor y del lugar de consulta cuando corresponda.*

## **8. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.**

**8.1 DESARROLLOS TECNOLÓGICOS.** *Describir la naturaleza de la innovación o mejora alcanzada, si se trata de una innovación a nivel regional, nacional o internacional, con qué financiamiento se ha realizado, su utilización potencial o actual por parte de empresas u otras entidades, incidencia en el mercado y niveles de facturación del respectivo producto o servicio y toda otra información conducente a demostrar la relevancia de la tecnología desarrollada.*

**8.2 PATENTES O EQUIVALENTES.** *Indicar los datos del registro, si han sido vendidos o licenciados los derechos y todo otro dato que permita evaluar su relevancia.*

**8.3 PROYECTOS POTENCIALMENTE TRANSFERIBLES, NO CONCLUIDOS Y QUE ESTAN EN DESARROLLO.** *Describir objetivos perseguidos, breve reseña de la labor realizada y grado de avance. Detallar instituciones, empresas y/o organismos solicitantes.*

**8.4 OTRAS ACTIVIDADES TECNOLÓGICAS CUYOS RESULTADOS NO SEAN PUBLICABLES** *(desarrollo de equipamientos, montajes de laboratorios, etc.).*

**8.5 Sugiera nombres (e informe las direcciones) de las personas de la actividad privada y/o pública que conocen su trabajo y que pueden opinar sobre la relevancia y el impacto económico y/o social de la/s tecnología/s desarrollada/s.**

- 9. SERVICIOS TECNOLÓGICOS.** Indicar qué tipo de servicios ha realizado, el grado de complejidad de los mismos, qué porcentaje aproximado de su tiempo le demandan y los montos de facturación.

Nuestro Laboratorio de Adsorción del INIFTA ha sido autorizado a prestar Servicios Tecnológicos de Alto Nivel (STAN) para el asesoramiento a empresas bajo el sistema de servicios a terceros de acuerdo a la resolución 3276 del 16-12-07 del directorio del CONICET.

- 10. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:**  
**10.1 DOCENCIA**

**10.2 DIVULGACIÓN**

- 11. DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES.** Indicar nombres de los dirigidos, Instituciones de dependencia, temas de investigación y períodos.  
INVESTIGADORES

Nombre: M. Rafti  
Institución: CONICET, Investigador Asistente  
Tema: Cinética de adsorción de gases sobre superficies de carbón nanoestructuradas.  
Período: 2013-2014, Director: Dr. JL. Vicente

**BECARIOS**

Nombre: A.G. Albesa  
Institución: CONICET, Investigador Asistente  
Tema: Adsorción Física sobre estructuras de carbono.  
Período: 2013-2014, Director: Dr. JL. Vicente

- 12. DIRECCION DE TESIS.** Indicar nombres de los dirigidos y temas desarrollados y aclarar si las tesis son de maestría o de doctorado y si están en ejecución o han sido defendidas; en este último caso citar fecha.

Tesis de Doctorado

[1] Nombre: Lic. M. Rafti

Tema: Estudio de estructuras disipativas en catálisis heterogénea.  
Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.  
Calificación: 10 (sobresaliente). 2007.

[2] Nombre: Lic. Alberto G. Albesa

Tema: Estudio de la adsorción de gases en nanoestructuras de carbón.  
Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.  
Calificación: 10 (sobresaliente) 2011.

[3] Nombre: Lic. Pablo Húmpola

Tema: Estudio de la adsorción de compuestos biorrefractarios en soluciones acuosas  
Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Bioquímica y Farmacia de la UNL.  
Calificación: 10 (sobresaliente) 2013.

[4] Nombre: Msc. María C. Cordero

Tema: Características fractales en interfases eléctricas y electroquímicas.  
Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.  
Tesis en ejecución.

**13. PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS.** *Indicar la denominación, lugar y fecha de realización, tipo de participación que le cupo, títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas y autores de los mismos.*

II Simposio sobre adsorción, adsorbentes y sus aplicaciones. San Luis. 20/02/2013 al 22/03/2013.

“Experimentos sobre la inversión de selectividad para etapas tempranas en la adsorción de mezclas Ar-CH<sub>4</sub> sobre grafito exfoliado”.

M. Rafti; A.G. Albesa; A.D. Migone; J.L. Vicente

XXX Congreso Argentino de Química. Buenos Aires. 03/09/2014 al 05/09/2014.

“Síntesis, caracterización y aplicaciones de nanopartículas magnéticas recubiertas con films porosos”.

M. Rafti; L. Carlos; E. Flores; J. Llanos; E. Fertitta; J.L. Vicente.

“Estudio de la adsorción en nanohorns de carbono”

Prof. Dr. A.D. Migone, Southern Illinois University, EEUU.

Conferencia de Profesor invitado por el grupo de investigación del Dr. J.L. Vicente

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas. La Plata. Agosto 2013.

**14. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC.** *Señalar características del curso o motivo del viaje, período, instituciones visitadas, etc.*

**15. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO.** *Indicar institución otorgante, fines de los mismos y montos recibidos.*

[1] Subsidio Institucional a Investigadores CIC

Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires

Período: a partir del 10/04/12

Monto: \$ 5100

[2] Subsidio del Proyecto de Investigación y desarrollo 11/X503

Universidad Nacional de La Plata, SCyT

Período: 2012 – 2013

Monto: \$ 12000

[2] Subsidio Institucional a Investigadores CIC

Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires

Período: a partir del 4/05/13

Monto: \$ 7000

**16. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO.** *Describir la naturaleza de los contratos con empresas y/o organismos públicos.*

Algunos investigadores de mi grupo de trabajo han obtenido ayudas financieras para viajes y estancias a los efectos de realizar tareas de investigación en el extranjero, en este período en particular las mismas fueron a Alemania, a través de convenios DFG(Deutsche Forschungsgemeinschaft)-CONICET, y a Estados Unidos de Norte América a través de convenios NSF(National Science Foundation)-CONICET.

**17. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.**

**18. ACTUACION EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCION O EJECUCION CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA.** *Indicar las principales gestiones realizadas durante el período y porcentaje aproximado de su tiempo que ha utilizado.*

- [1] Director del Proyecto "Adsorción Físicoquímica sobre superficies heterogéneas"  
Institución: Universidad Nacional de La Plata  
Período: 2010-2013 y 2013-2016  
Lugar: Inst. de Invest. Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, INIFTA, Fac.Cs.Extas.
- [2] Miembro de la Consejo Directivo  
Institución: Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata  
Período: 2011-2013  
Lugar: Facultad de Ciencias Exactas.
- [3] Miembro Titular del Comité Científico  
Institución: Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)  
Período: 2012-2014.  
Lugar: Facultad de Ciencias Exactas.

**19. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO.** *Indicar el porcentaje aproximado de su tiempo que le han demandado.*

- [1] Profesor Adjunto Ordinario, Dedicación Exclusiva.  
Institución: Facultad de Ciencias Exactas. UNLP.  
Período: 2012-2018  
Asignatura: Matemáticas Especiales y Métodos Numéricos, Lic. Química 8º cuatrimestre.  
Demandando aproximadamente un 10% del tiempo.

**20. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES.** *Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período.*

El Dr. M. Rafti, como Investigador Asistente de CONICET bajo mi dirección, se trasladó en primer lugar al Laboratorio del Prof. Dr. Ronald Imbihl, del Instituto de Físicoquímica y Electro-química, dependiente de la Universidad de Hannover, Alemania, desde julio a agosto de 2013, a fin de completar estudios vinculados a la cinética de reacciones de oxidación de amoníaco sobre superficies monocristalinas, posteriormente se trasladó al Laboratorio del Prof. Dr. Adam Matzger, del Departamento de Química, dependiente de la Universidad de Michigan, EEUU, desde diciembre de 2013 a febrero de 2014, para familiarizarse con nuevas técnicas de síntesis de nanoestructuras metal-orgánicas (MOF). Mientras que el Dr. A.G. Albesa, también Investigador Asistente de CONICET bajo mi dirección, se trasladó al Laboratorio del Prof. Dr. A. D. Migone, en el Departamento de Física de la Universidad de Southern Illinois, EEUU, desde octubre hasta noviembre de 2013, para completar los estudios vinculados a la adsorción de mezclas de gases de efecto invernadero sobre distintos sustratos de carbono.

**21. TITULO Y PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO.** *Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicitar la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

"Desarrollo de modelos teóricos de interés físicoquímico"

Las tareas a realizar, dentro de las tres áreas de trabajo planteadas, están vinculadas a la resolución de problemas energéticos y medio ambientales que afectan cada día más a la provincia de Buenos Aires, tratando de encontrar dichas soluciones en las potenciales con que cuenta nuestra región. Tales áreas son:

1) Adsorción física de gases sobre sólidos

El gas natural (GN), desde el punto de vista energético, resulta ventajoso frente a otros combustibles, su debilidad está en el almacenamiento. Para almacenar GN (principalmente compuesto por CH<sub>4</sub>), se lo debe comprimir, requiriendo caros y pesados

tanques que soporten altas presiones. Una forma de volver competitivo al GN es desarrollando métodos que permitan almacenarlo cantidades semejantes pero a presiones más bajas (2 – 4 MPa), para así disminuir el precio y el peso de los tanques. Este es uno de los principales motivos por lo que buscamos encontrar adsorbentes que hagan viable la capacidad de almacenamiento de gas natural a bajas presiones.

En este contexto caracterizaremos distintos sustratos porosos: carbones activados, fullerenos, nanotubos de carbón, y estructuras metal-orgánicas (MOFs), mediante isothermas de adsorción, Rayos-X, e IR. De dichos sustratos se explorará tanto su capacidad para adsorber CH<sub>4</sub> a distintas presiones y temperaturas, como su eficiencia a la hora de separar mezclas de gases simples (CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>). Estos estudios además de los resultados experimentales, involucrarán en desarrollo de simulaciones numéricas de tales sistemas, y la elaboración de modelos que expliquen el comportamiento observado. Parte de estas labores ya se están realizando a través de la cooperación con otros grupos de INIFTA y del extranjero. Los últimos resultados fueron el estudio experimental y teórico de la adsorción de CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> donde se propusieron nuevos enfoques para su descripción.

#### 2) Adsorción de compuestos biorrefractarios desde soluciones acuosas

Los compuestos biorrefractarios, provenientes de agro pesticidas o desechos industriales, son importantes contaminantes del agua, y como los tratamientos biológicos no los eliminan, y el ataque químico termina generando nuevos compuestos que resultan más peligrosos que los originales, debe recurrirse a la adsorción fisicoquímica. La eficiencia (relación costo–beneficio) de esta última, es mucho mayor en bajos, aunque peligrosos, grados de contaminación. Si, como adsorbentes, se emplean carbones activados, se puede contar con múltiples ventajas, ya que es barato, fácil de regenerar, y muchos de los desechos industriales y/o agropecuarios pueden convertirse en carbón y luego activarse, más allá de las aun no explotadas reservas de carbón y gas natural con que cuenta la provincia de Buenos Aires.

En esta área estudiaremos la adsorción de compuestos de Fenol, Imazapir, y Glifosato, sobre distintos carbones activados. Como en 1), también se realizaran las simulaciones numéricas de dichos sistemas y se buscara formular modelos que expliquen el comportamiento observado. Algunos resultados preliminares ya han sido publicados, y presentados en Tesis de Doctorado y Tesinas de Grado realizadas en el marco del proyecto de investigación.

#### 3) Adsorción en sistemas alejados del equilibrio

El crecimiento económico de la provincia, se ve reflejado tanto en la concentración industrial, como en el aumento del parque automotor, siendo la contaminación atmosférica uno de sus mayores costos. Una forma de reducir la cantidad de gases CO y NO, es disminuyendo su concentración cerca de los puntos de emisión, ya sea adsorbiéndolos y/o haciéndolos reaccionar sobre superficies catalizadoras. En este campo la remoción de NH<sub>3</sub> y NO en convertidores catalíticos es ejemplo de la importancia, industrial y medio ambiental que tiene la oxidación de NH<sub>3</sub> sobre caras cristalinas de ciertos metales. Por este motivo la obtención y estudio de catalizadores auto regenerados se está convertido en un tema de vital importancia. Dentro de esta área ya hemos iniciado trabajos en colaboración con varias universidades europeas, y continuaremos, tanto la fase experimental, como la descripción teórica, de la adsorción y reacción de NO y NH<sub>3</sub> sobre distintos catalizadores metálicos.

---

### **Condiciones de la presentación:**

- A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Investigador, la que deberá incluir:

- 
- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 21).
  - b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, en otra carpeta o caja, en cuyo rótulo se consignará el apellido y nombres del investigador y la leyenda "Informe Científico Período .....".
  - c. Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico:
- a. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: [ininvest@cic.gba.gov.ar](mailto:ininvest@cic.gba.gov.ar) (puntos 1 al 21), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
  - b. En el mismo correo electrónico referido en el punto a), se deberá incluir como un segundo documento un currículum resumido (no más de dos páginas A4), consignando apellido y nombres, disciplina de investigación, trabajos publicados en el período informado (con las direcciones de Internet de las respectivas revistas) y un resumen del proyecto de investigación en no más de 250 palabras, incluyendo palabras clave.

---

**Nota:** El Investigador que desee ser considerado a los fines de una promoción, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.