

# **XIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA**



**7 al 10 de Abril de 2003  
- Bahía Blanca / Argentina -**

*aiifq*

Asociación Argentina de  
Investigación Físicoquímica  
25° Aniversario

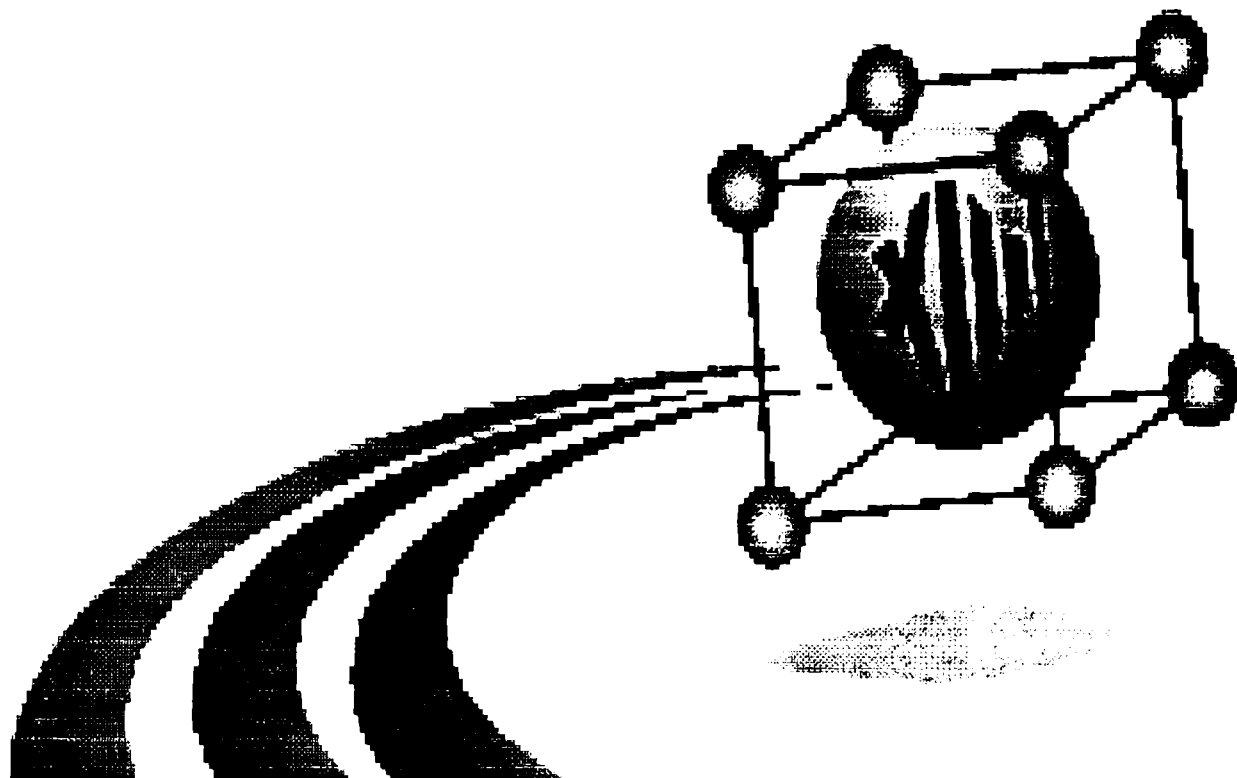


Universidad Nacional  
del Sur

## **LIBRO DE RESUMENES Tomo II**

*En adhesión al 175° Aniversario  
de la fundación de la ciudad de Bahía Blanca*

LIBRO DE RESÚMENES / TOMO II



**XIII**

**Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y  
Química Inorgánica**

**BAHÍA BLANCA – BUENOS AIRES – ARGENTINA**

**7 AL 10 DE ABRIL DE 2003**

*aaifQ*

**ASOCIACIÓN ARGENTINA  
DE INVESTIGACIÓN FISICOQUÍMICA**



**UNIVERSIDAD  
NACIONAL DEL SUR**

19  
C62  
L2764b)

C I D E P I N T

DOCUMENTACION CIENTIFICA

(27646)

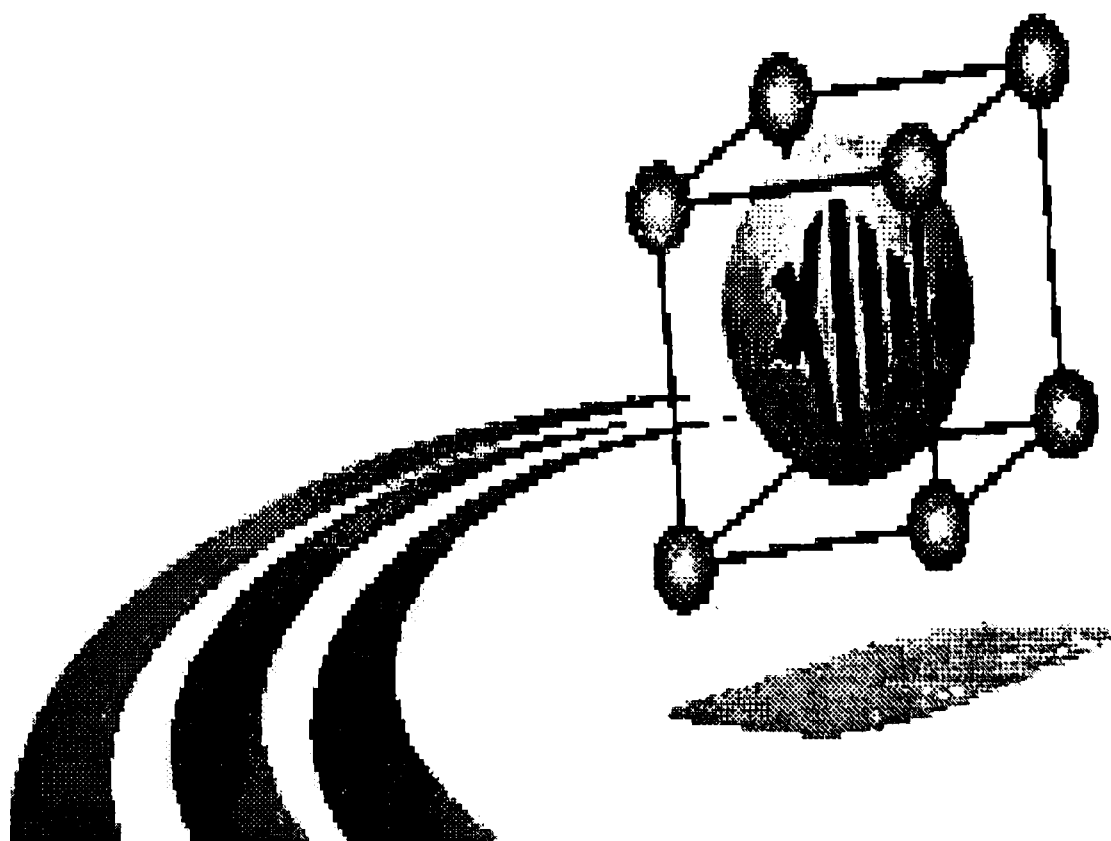
abril/2003



**C I D E P I N Y**  
CENTRO DE INVESTIGACION Y DESARROLLO  
EN TECNOLOGIA DE PINTURAS  
C I C — C O N I C E T  
79 - 121 y 122      1900 La Plata

## ***SECCIÓN D***

# ***ELECTROQUÍMICA BÁSICA Y APLICADA***



**XIII Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y Química Inorgánica.  
7 al 10 de Abril – 2003 - Bahía Blanca - Argentina**

## SECCIÓN D

| Sección y Número | TÍTULO   | AUTORES   | Modalidad |
|------------------|--|---|-----------|
| D1               | COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE NITRATO REDUCTASA AUTOENSAMBLADA. ESTUDIOS ELECTROQUÍMICOS Y ELECTROACÚSTICOS                           | <u>Nancy F. Ferreyra</u> , Erica S. Forzani, Liliane Coche-Guérante, Pierre Labbé, Ernesto J. Calvo, Velia M. Solís | Oral      |
| D2               | INTERCAMBIO DE ELECTROLITO CON TRANSPORTE DE SOLVENTE EN LOS CAMBIOS DE VOLUMEN DURANTE LA CONMUTACION REDOX EN POLIANILINA              | L. Lizarraga, E. M. Andrade y <u>F. V. Molina</u>   | Poster    |
| D3               | REGENERACIÓN DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE ELECTRODOS DE ORO EN LA DETECCIÓN DE TRANS RESVERATROL  | Adrián M. Granero, María A. Zón, Héctor Fernández   | Poster    |
| D4               | LA INTERFACE ORO POLI-O-AMINOFENOL ESTUDIADA MEDIANTE LA TECNICA DE LA RESISTENCIA SUPERFICIAL   | R.I Tucceri   | Poster    |
| D5               | ESTUDIO ELECTROQUÍMICO DE LA TRANSFERENCIA DE HERBICIDAS DE LA FAMILIA DE S-TRIAZINAS A TRAVES DE LA INTERFASE AGUA / 1,2 - DICLOROETANO | A.V. Juárez, <u>L.M. Yudi</u> .   | Poster    |
| D6               | EL PROCESO ELECTROQUÍMICO DE DEPOSITO DE NI SOBRE PELICULAS DELGADAS DE ORO ESTUDIADO MEDIANTE LA TECNICA DE LA RESISTENCIA SUPERFICIAL  | M. Fonticelli, D. Posadas, <u>R.I Tucceri</u>   | Oral      |
| D7               | DETECCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE LA FITOTOXINA CERCOSPORÍN MEDIANTE TÉCNICAS ELECTROANALÍTICAS EN EXTRACTOS DE HOJAS DE MANI                | Nancy C. Marchiando, María A. Zón, Héctor Fernández   | Poster    |

|     |  |  |        |
|-----|--|--|--------|
| D8  | ESTUDIOS ELECTROQUIMICOS DE LA MICOTOXINA ZEARALENONA OBTENIDA A PARTIR DE ARROZ FERMENTADO POR INOCULACIÓN DE <i>FUSARIUM GRAMINEARUM</i> | Patricia G. Molina, María A. Zón, Sofia Chulze, Héctor Fernández     | Poster |
| D9  | ESTUDIO DEL MECANISMO DE DESCARGA Y PERMEACIÓN DE HIDRÓGENO EN PALADIO   | P. Bruzzoni, R.M. Carranza, J.R. Collet Lacoste, <u>E.M. Welti</u> . | Poster |
| D10 | EFICIENCIA DE INHIBIDORES DE CORROSIÓN EN MEDIOS SALINOS CON DIÓXIDO DE CARBONO  | <u>López, D.A.</u> , Simison, S.N. y Rosso S.                        | Oral   |
| D11 | UN NUEVO MODELO DE CARATERIZACION ELECTRODOS DE HIDRURO METÁLICO POR ESPECTROSCOPIA DE IMPEDANCIA ELECTROQUIMICA                           | <u>A. BONESI</u> , B. CASTRO, S. REAL, A. VISINTIN, W. E. TRIACA     | Poster |
| D12 | INFLUENCIA DEL POLIETILENGLICOL (PEG) EN EL PROCESO DE ELECTRODEPOSICIÓN DE COBRE  | <u>Ana L. Portela</u> , Gabriela I. Lacconi y Manuel López Teijelo   | Poster |
| D13 | ELECTRODEPOSICION DE POLIPIRROL SOBRE ELECTRODOS DE ALUMINIO EN SOLUCIONES ALCALINAS   | Silvana. B. Saidman  | Poster |
| D14 | COMPORTAMIENTO REDOX DE POLIPIRROL ELECTRODEPOSITADO SOBRE CARBONO VITREO EN SOLUCIONES ALCALINAS  | Silvana. B. Saidman  | Poster |
| D15 | ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DEL CAMPO ELÉCTRICO EN LA ADSORCIÓN DE METALES CON ESTRUCTURA (1x1) MEDIANTE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS      | <u>María C. Giménez</u> , Sergio A. Dassie y Ezequiel P. M. Leiva    | Poster |
| D16 | II. - ESTUDIO DE LA ELECTROOXIDACION DE 1,1'-NAFTIDINA EN MEDIO ACUOSO Y FORMACIÓN DE PELÍCULAS SOBRE ELECTRODOS DE PLATINO                | J. Gavotti, F. D'Eramo, L. Sereno and <u>A. H. Arévalo</u>           | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| D17 | ESTUDIOS COMPUTACIONALES DE NANOESTRUCTURACIÓN INDUCIDA POR DEFECTOS  | <u>N. B. Luque</u> , <u>M. G. Del Pópolo</u> , <u>F. P. M. Leiva</u>         | Poster |
| D18 | CAPACIDAD DE COMPLEJAMIENTO EN SISTEMAS MODELO Y EN MEDIOS ACUATICOS NATURALES  | <u>Y. S. Minaberry</u> y <u>G. J. Gordillo</u>                               | Poster |
| D19 | ANALISIS DE TECNICAS ELECTROQUIMICAS PARA LA DETERMINACION DE LA VELOCIDAD DE CORROSION DEL ACERO EN ESTRUCTURAS DE HORMIGON ARMADO | <u>E. A. Arva</u> , <u>W. Morris</u> y <u>G. S. Duffó</u>                    | Poster |
| D20 | MECANISMO DE LA CORROSION BAJO TENSION DE MATERIALES H.C.P. EN SOLUCIONES DE YODO   | <u>S. Farina</u> , <u>G. S. Duffó</u> y <u>J. R. Galvele</u>                 | Poster |
| D21 | EL EFECTO DEL PH SOBRE EL PROCESO REDOX DEL POLI-O-AMINOFENOL ESTUDIADO MEDIANTE MEDIDAS DE RESISTENCIA SUPERFICIAL                 | <u>R. I. Tucceri</u>   | Poster |
| D22 | ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD DE TETRACICLINAS EN SOLUCIÓN ACUOSA   | <u>R. A. Fernández</u> y <u>S. A. Dassie</u>                                 | Poster |
| D23 | TRANSFERENCIA COMPETITIVA DE UNA MEZCLA DE CATIONES A TRAVÉS DE INTERFASES LIQUIDAS   | <u>C. Arrua</u> y <u>S. A. Dassie</u>  | Poster |
| D24 | <b>RETIRADO</b>   |  |        |
| D25 | REACCIONES DE INTERCAMBIO DE LIGANDOS Y CATIONES A TRAVÉS DE INTERFACES LIQUIDAS  | <u>J. I. Garcia</u> , <u>R. A. Iglesias</u> y <u>S. A. Dassie</u>            | Oral   |
| D26 | REACCIONES QUÍMICAS ACOPLADAS A LA TRANSFERENCIA DE IONES A TRAVÉS DE INTERFACES LÍQUIDAS   | <u>Sergio A. Dassie</u> , <u>Rodrigo A. Iglesias</u> y <u>Ana M. Baruzzi</u> | Poster |
| D27 | ANÁLISIS ELECTROQUIMICO DE MINOXIDIL Y SU DETERMINACION EN MUESTRAS FARMACEUTICAS   | <u>Maria Valeria Pfaffen</u> y <u>Patricia I. Ortiz</u>                      | Poster |
| D28 | <b>RETIRADO</b>   |  |        |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| D29 | CONDUCCION IONICA EN HALOGENUROS DE PLATA DOPADOS CON MONTMORILLONITA   | J.C. Bazán, <u>Nelson J. García</u> , Alicia Robledo y Carla V. Spetter. | Poster |
| D30 | CARACTERIZACIÓN DE LAS PELÍCULAS SUPERFICIALES FORMADAS SOBRE COBRE Y LATÓN AL ALUMINIO EN AGUA POTABLE                                 | <u>Valcarce, M. B.</u> , Vázquez M. V. y Rosso S.                        | Poster |
| D31 | EFFECTO DE LA CORRIENTE Y LA CONCENTRACION ANALISIS DE LOS CAMBIOS MORFOLOGICOS EN ECD  | Graciela A. GONZÁLEZ, Guillermo MARSHALL, <u>Fernando MOLINA</u>         | Poster |
| D32 | FOTOLUMINISCENCIA DE POLIMEROS DE ARILAMINAS  | P. S. Antonel, E. M. Andrade y <u>F. V. Molina</u>                       | Poster |
| D33 | ESTUDIO DE LA DEPOSICION DE PLATA A PARTIR DE IODURO DE PLATA DISUELTO EN IODURO DE POTASIO   | <u>María C. S. de Maffi</u> y Julio C. Bazán                             | Poster |
| D34 | ESTUDIO ELECTROQUÍMICO DE AMINOÁCIDOS PRESENTES EN TOXINAS MICROCISTINAS  | D. A. Baletka, M. I. Manzanares Cuello, <u>O. R. Cámara</u>              | Poster |
| D35 | ESTUDIO COMPARATIVO DE MATRICES ENZIMÁTICAS PARA SU USO EN UN BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO DE OXALATO  | M. Calderón, M. C. Strumia R. Capra y <u>A. M. Baruzzi</u>               | Poster |
| D36 | TRANSFERENCIA DEL COMPLEJO Al(III)-OFLOXACINA A TRAVÉS DE LA INTERFASE AGUA   1,2 - DICLOROETANO MODIFICADA CON UNA MONOCAPA DE LÍPIDOS | A.I. Azcurra, L.M. Yudi y <u>A.M. Baruzzi</u>                            | Poster |
| D37 | ELECTRODO CATALITICO DE POLIANILINA   | T. Kessler, A.M. Castro Luna   | Poster |
| D38 | ANÁLISIS DE ENROFLOXACINA MEDIANTE TÉCNICAS ELECTROQUÍMICAS Y DE HPLC   | <u>S. Sereno</u> , J. M. Marioli, L. E. Sereno                           | Poster |
| D39 | INFLUENCIA DE Fe <sup>2+</sup> EN LA ELECTRODEPOSICIÓN DE MnO <sub>2</sub>  | A.S. Pilla, M.M.E. Duarte, J.F. Mandará y C.E. Mayer                     | Poster |

|     |   |   |        |
|-----|---|---|--------|
| D40 | ALTOS VALORES DE FOTOCORRIENTE PRODUCIDOS POR Pd-PORFIRINA SOBRE SnO <sub>2</sub> NANOESTRUCTURADO Y EN FILMS DE LANGMUIR-BLODGETT        | <u>Miguel Gervaldo</u> , <u>María Elisa Milanesio</u> , César Marchiando, Luis Otero, Edgardo N. Durantini, Juana J. Silber y Leonides E. Sereno. | Poster |
| D41 | FOTOSENSIBILIZACION DE PELÍCULAS DE SnO <sub>2</sub> POR PARTE DE UNA DIADA, PORFIRINA-PORFIRINA ELECTRON-DONOR ACEPTOR                   | <u>Miguel Gervaldo</u> , <u>María Elisa Milanesio</u> , Luis Otero, Edgardo N. Durantini, Juana J. Silber y Leonides E. Sereno.                   | Poster |
| D42 | PROPIEDADES FOTOELÉCTRICAS DE Zn(II) PORFIRINA-C <sub>60</sub> CON USO POTENCIAL EN CELDAS SOLARES  | <u>María Elisa Milanesio</u> , <u>Miguel Gervaldo</u> , Luis Otero, Edgardo N. Durantini, Juana J. Silber y Leonides E. Sereno                    | Poster |
| D43 | DESARROLLO DE UN METODO ELECTROQUIMICO PARA LA DETERMINACION DE ACIDO SALICILICO EN FORMULACIONES FARMACEUTICAS DE ACIDO ACETILSALICILICO | Torriero A. A. J., Luco J. M., <u>Sereno L.</u> , Raba J.   | Poster |
| D44 | COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE ELECTRODOS POLICRISTALINOS DE PLATA EN PRESENCIA DE SULFURO.   | Oscar A. Oviedo, <u>María F. Juárez</u> , <u>Verónica Brunetti</u> y Manuel López Teijelo   | Poster |
| D45 | ESTUDIO ELECTROQUÍMICO Y ELIPSOMÉTRICO DE LA DISOLUCIÓN DE PELÍCULAS ANÓDICAS DE Bi <sub>2</sub> O <sub>3</sub> EN ELECTROLITOS ACUOSOS   | <u>Valeria C. Fuertes</u> , Omar E. Linarez Pérez, Manuel A. Pérez y Manuel López Teijelo   | Poster |
| D46 | CARACTERIZACIÓN DEL CRECIMIENTO Y DEL PROCESO DE CARGA/DESCARGA DE PELÍCULAS DELGADAS DE ÓXIDO DE MANGANESO                               | Beatriz A. López de Mishima y <u>Manuel López Teijelo</u>   | Oral   |
| D47 | CINÉTICA Y MECANISMO DEL CRECIMIENTO DE PELÍCULAS ANÓDICAS SOBRE ELECTRODOS DE Pb EN SOLUCIONES ACUOSAS DE HCl                            | María Eugenia Alassia, <u>Manuel A. Pérez</u> y Manuel López Teijelo  | Poster |

|     |  |  |        |
|-----|--|--|--------|
| D48 | CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA Y ELIPSOMÉTRICA DEL CRECIMIENTO Y ESTABILIDAD DE PELÍCULAS ANÓDICAS DE Sb <sub>2</sub> O <sub>3</sub> EN ELECTROLITOS ACUOSOS | <u>Omar E. Linarez Pérez</u> , Manuel A. Pérez y Manuel López Teijelo  | Oral   |
| D49 | CORROSION DE ACEROS DE ARMADURA  | <u>L. M. Gassa</u> <sup>1</sup> y M. R. Barbosa  | Oral   |
| D50 | ELECTROQUÍMICA Y FÍSICO-QUÍMICA DE POLÍMEROS DERIVADOS DE ANILINA  | <u>Diego L. Raffa</u> <sup>1</sup> ; Fernando Battaglini <sup>1</sup> ; Tong Leung <sup>2</sup>  | Oral   |
| D51 | <b>RETIRADO</b>  |  |        |
| D52 | <b>RETIRADO</b>  |  |        |
| D53 | RECUBRIMIENTOS VÍTREOS POR EL MÉTODO SOL - GEL PARA ACEROS INOXIDABLES   | X. Gaviria, C. García, <u>S. Ceré</u>  | Poster |
| D54 | <b>RETIRADO</b>  |  |        |
| D55 | ESTUDIOS ESPECTROELECTROQUÍMICOS SOBRE LA RELAJACIÓN DE PELÍCULAS DE POLÍMEROS DERIVADOS DE ARILAMINAS SUSTITUIDAS EN EL ANILLO DEPOSITADAS SOBRE ELECTRODOS | L.G. Gagliardi, <u>M.J. Rodríguez Presa</u> , M. I. Florit, D. Posadas*  | Poster |
| D56 | COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DEL ESTAÑO PASIVADO EN SOLUCIONES ALCALINAS  | <u>Patricia E. ALVAREZ</u> , M. Eugenia FOLQUER y Claudio A. GERVASI   | Poster |
| D57 | ESTUDIO ELECTROQUÍMICO DE LAS PRIMERAS CAPAS DE ÓXIDO FORMADAS SOBRE COBRE EN SOLUCIONES DE CARBONATO-BICARBONATO  | S.B. Ribotta <sup>1</sup> , C.F. Arrighi <sup>1</sup> , L.F. La Morgia <sup>1</sup> , L.M. Gassa <sup>2</sup> , <u>M.E. Folquer</u> <sup>1</sup> | Poster |
| D58 | ESTUDIO DINAMICO DEL SISTEMA Ni(OH) <sub>2</sub> / NiOOH EN PRESENCIA DE CATIONES FORÁNEOS   | Marta E. UÑATES <sup>1</sup> , <u>María E. FOLQUER</u> <sup>1</sup> y Silvia G. REAL <sup>2</sup>  | Poster |
| D59 | ESTUDIO COMPARATIVO DE MONOCAPAS DE OCTANOTIOL Y OCTANODITIOL SOBRE Au (111)   | <u>M. L. CAROT</u> , M. J. ESPLANDIU, E. M. PATRITO y V. A. MACAGNO  | Oral   |
| D60 | CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA Y ESTRUCTURAL DE MONOCAPAS  | <u>M. L. CAROT</u> , E. MORÁN, V. A. MACAGNO y E. M. PATRITO   | Poster |

|     |  |   |        |
|-----|--|---|--------|
|     | AUTOENSAMBLADAS DE<br>ÁCIDOS<br>MERCAPTOALCANOICOS<br>SOBRE Au (111)   |   |        |
| D61 | <b>RETIRADO</b>  |   |        |
| D62 | DESARROLLO DE UNA CELDA<br>DE ELECTROSINTESIS<br>ORGANICA  | M. Vago, E.J. Calvo   | Poster |
| D63 | MICROSCOPIA<br>ELECTROQUÍMICA DE<br>BARRIDO (SECM) DE<br>PELÍCULAS ENZIMATICAS<br>AUTOENSAMBLADAS  | C. González-Inchauspe, E. Forzani,<br>P. Perna, E.J. Calvo                          | Poster |
| D64 | ESTUDIO ESPECTROSCOPICO<br>IN SITU DE TIOUREA(TU)<br>ADSORBIDA SOBRE<br>ELECTRODOS DE PLATINO  | José L. Rodríguez, Elena Pastor,<br>Gonzalo García y <u>Gabriela I.<br/>Lacconi</u> | Poster |
| D65 | ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO<br>DE LA ELECTRO-OXIDACION<br>DE TIOUREA SOBRE<br>ELECTRODOS DE ORO EN<br>SOLUCIONES ACIDAS<br>UTILIZANDO FTIRRAS  | A. E. Bolzán, T. Iwasita y A. J.<br>Arvia   | Oral   |
| D66 | COMPORTAMIENTO<br>VOLTAMPEROMÉTRICO Y<br>ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO<br>POR FTIR DE LOS<br>PRODUCTOS DE ELECTRO-<br>OXIDACIÓN DE TIOUREA Y<br>TIOUREAS SUSTITUÍDAS<br>SOBRE ELECTRODOS DE<br>PLATINO EN MEDIO ACIDO | A. E. Bolzán, P. L. Schilardi, A.<br>Cuesta, R. C. V. Piatti y A. J.<br>Arvia       | Poster |
| D67 | PREPARACIÓN DE MnO <sub>2</sub> A<br>PARTIR DE LIXIVIADOS DE<br>PILAS ALCALINAS<br>AGOTADAS  | C.A. Andrade Tacca y <u>M. M. E.<br/>Duarte</u>                                     | Poster |
| D68 | DESARROLLO DE SENSORES<br>ELECTROQUIMICOS PARA EL<br>DOSAJE DE ANTIOXIDANTES<br>FENOLICOS EN MATRICES<br>ALIMENTARIAS  | S. ALARCÓN, D.<br>CAMPAGNONE, M DEL<br>CARLO y G. PALLESCHI.                        | Poster |

|     |  |  |        |
|-----|--|--|--------|
| D69 | DESARROLLO DE UN SENSOR ELECTROQUÍMICO PARA LA DETECCIÓN DE ANTICUERPOS ANTI-TRIPANOSOMA <i>cruzi</i> .  | <u>Lagier C.M.</u> , <sup>1</sup> <u>Alarcón S.H.</u> , <sup>1</sup> <u>Pagani D.</u> , <sup>1</sup> <u>Marcipar I.</u> <sup>2</sup> y <u>Marcipar A.</u> <sup>2</sup> | Poster |
| D70 | COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE LA TIUREA SOBRE ELECTRODOS DE ORO EN SOLUCIONES ACIDAS  | <u>A. E. Bolzán</u> , <u>L. M. Gassa</u> , <u>R. C. V. Piatti</u> y <u>A. J. Arvia</u>   | Poster |
| D71 | BIOSENSOR DE GLUCOSA BASADO EN LA INMOVILIZACIÓN DE GLUCOSA OXIDASA SOBRE ELECTRODOS DE CARBONO RODINIZADOS  | Silvia A. MISCORIA, <u>Gustavo D. BARRERA</u> . <u>Gustavo A. RIVAS</u>  | Oral   |
| D72 | BIOSENSOR ENZIMÁTICO PARA LA CUANTIFICACIÓN DE GLUCOSA PREPARADO POR AUTOENSAMBLADO DE POLIELECTROLITOS SOBRE SUPERFICIES DE ORO                     | <u>M. C. RODRÍGUEZ</u> y <u>G. A. RIVAS</u>  | Poster |
| D73 | BIOSENSOR ENZIMÁTICO PARA FENOLES Y CATECOLES BASADO EN AUTOENSAMBLADOS DE QUITOSANO Y POLIFENOL OXIDASA. APLICACIONES ANALÍTICAS Y ESTUDIO CINÉTICO | <u>M. C. RODRÍGUEZ</u> , <u>J. DESBRIERES</u> , <u>L. COCHEGUÉRENTE</u> , <u>P. LABBÉ</u> and <u>G. A. RIVAS</u>   | Poster |
| D74 | <b>RETIRADO</b>  |  |        |
| D75 | USO DE UN POLÍMERO MELÁNICO PARA MEJORAR LA SELECTIVIDAD DE BIOSENSORES DE GLUCOSA   | <u>María D. RUBIANES</u> y <u>Gustavo A. RIVAS</u>   | Poster |
| D76 | <b>RETIRADO</b>  |  |        |
| D77 | VOLTAMETRÍA DE ONDA CUADRADA APLICADA AL ESTUDIO DEL MECANISMO DE ELECTROADSORCIÓN OXIDATIVA DE DERIVADOS DE LA QUINOLINA SOBRE Hg                   | <u>Fernando S. GARAY</u> y <u>Velia M. SOLIS</u>   | Oral   |
| D78 | DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS: EFECTO DE LA VELOCIDAD DE BARRIDO   | <u>V. Costanza</u> , <u>M. R. Canto</u> , <u>C. A. Marozzi</u> y <u>A. C. Chialvo</u>  | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| D79 | ESTUDIO ELECTROQUIMICO de <i>pseudomona sp</i> SOBRE LATON AL ALUMINIO.   | Frontini, María Alejandra, Rosso de Sánchez, Susana  | Poster |
| D80 | ESTUDIO COMPARATIVO DE LA RESPUESTA VOLTAMÉTRICA DE ONDA CUADRADA CORRESPONDIENTE A COMPLEJOS DE COBRE CON DERIVADOS DE LA QUINOLINA ANALIZADOS A DIFERENTES pH | Fernando S. GARAY y Velia M. SOLIS   | Poster |
| D81 | <b>RETIRADO</b>   |  |        |
| D82 | REACCION DE OXIDACION DE HIDROGENO: INTERPRETACION DE LOS DIAGRAMAS DE LEVICH-KOUTECKY  | M.R. Gennero de Chialvo y A C Chialvo  | Poster |
| D83 | DESARROLLO DE MEMBRANAS FINAS PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ELECTROLITO POLIMERICO  | C. A. Marozzi, L. Krishnan, A. B. Bocarsly, S. Srinivasan  | Poster |
| D84 | ESTUDIO DE LA ADSORCION IRREVERSIBLE DE Bi SOBRE PLATINO POLICRISTALINO   | Paola M. Quaino, M.R. Gennero de Chialvo y A.C. Chialvo  | Poster |
| D85 | ESTUDIO CINÉTICO DE LA DISOLUCIÓN DE ORO CON TIUREA EN MEDIO ÁCIDO  | J. Oberholzer, C. San Sebastián, L.M. Gassa, C.A. Gervasi  | Oral   |
| D86 | ADSORCIÓN DE ÁCIDOS NUCLEICOS SOBRE ELECTRODOS DE CARBONO   | María Laura PEDANO y Gustavo A. RIVAS  | Poster |
| D87 | DESARROLLO DE UN SENSOR ELECTROQUÍMICO PARA LA DETECCIÓN DE ANTICUERPOS ANTI-TRIPANOSOMA <i>cruzi</i> .   | Lagier C.M., <sup>1</sup> Alarcón S.H., <sup>1</sup> Pagani D., <sup>1</sup> Marcipar I. <sup>2</sup> y Marcipar A. <sup>2</sup> | Poster |
| D88 | ESTUDIO DE LA ELECTRODEPOSICION DE NIQUEL EN PRESENCIA DE ACIDO NICOTINICO  | María Fernanda Mora y Gabriela I Lacconi   | Poster |
| D89 | <b>RETIRADO</b>   |  |        |
| D90 | ESTUDIOS STM- <i>IN SITU</i> DE LA ELECTRODEPOSICIÓN DE Cd SOBRE Au(111)  | M.C. del Barrio, S. G. Garcia y D. R. Salinas  | Poster |
| D91 | FORMACIÓN DE ALEACIÓN SUPERFICIAL EN EL SISTEMA Ag(111)/Cd <sup>++</sup> DURANTE EL PROCESO DE UPD  | S. G. Garcia y D. R. Salinas   | Poster |

|      |  |   |        |
|------|--|---|--------|
| D92  | INFLUENCIA DEL TRATAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE CARBONO VÍTREO EN LA DEPOSICIÓN DE Cu. ESTUDIO POR AFM                                | A. E. Alvarez, S. G. García, M. M. E. Duarte, D. R. Salinas y C. E. Mayer               | Poster |
| D93  | ESTADIOS INICIALES DE LA ELECTRODEPOSICIÓN DE Zn SOBRE HOPG EN PRESENCIA DE GELATINA   | <u>A. E. Alvarez</u> y D. R. Salinas.   | Poster |
| D94  | INFLUENCIA DE LOS ADITIVOS EN LA ELECTRODEPOSICIÓN DE CINC EN MEDIO ÁCIDO  | <u>Zulema A. Mahmud</u> , Gabriel Gordillo y Carlos Ventura Dalkaine                    | Poster |
| D95  | REACCION DE HIDROGENACION DE CHALCONA  | <u>M. Gutierrez</u> , N. Nazareno, B. A. Lopez de Mishima y H. Mishima                  | Poster |
| D96  | REDUCCION ELECTROQUIMICA DE DIOXIDO DE CARBONO SOBRE CATALIZADORES METALICOS   | <u>S. Pettinicchi</u> , R. Mignone, C. A. Cattaneo, B. A. Lopez de Mishima y H. Mishima | Poster |
| D97  | ELECTRODEPOSICION A SUBPOTENCIALES DE IONES METÁLICOS SOBRE ELECTRODOS MODIFICADOS CON MONOCAPAS AUTO-ORGANIZADAS                  | M. Cipollone, J. L. Frayse, M. H. Fonticelli, R. C. Salvarezza, <u>M. E. Martins</u>    | Poster |
| D98  | ESTUDIO ELECTROQUIMICO DEL CATECOL ADSORBIDO SOBRE ORO   | S. M. Esquenoni, A. E. Von Mengershausen y <u>M. G. Sustersic</u>                       | Poster |
| D99  | ESTUDIO ELECTROQUÍMICO y ESTRUCTURAL DE MONOCAPAS DE ALCANOTIOLES SOBRE SUSTRATOS DE Cu POLICRISTALINO y Cu (111)                  | <u>A. FERRAL</u> , F. E. MORÁN, E. M. PATRITO y V. A. MACAGNO                           | Poster |
| D100 | ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD ELECTROQUIMICA Y ORIENTACION MOLECULAR DE SISTEMAS AUTOENSAMBLADOS POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA IN-SITU | <u>Cecilia Bonazzola</u> , Francisco Carlos Nart  | Poster |
| D101 | ADSORCIÓN DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS SOBRE TIO <sub>2</sub> EFECTO DEL POTENCIAL   | Mauricio E. Calvo, Cecilia Bonazzola y <u>Sara A. Bilmes</u>                            | Oral   |

|      |   |  |        |
|------|---|--|--------|
| D102 | OXIDACIÓN DE AMONIACO SOBRE ELECTRODOS DE ALEACIONES DE PLATINO-IRIDIO  | F. E. Morán, C. Cattáneo, H. T. Mishima, P. Silveti y B. A. López de Mishima   | Oral   |
| D103 | ELECTROFORMACIÓN DE DENDRITAS METÁLICAS EN MEDIOS ACUOSOS ESTRUCTURADOS   | Miguel A. Pasquale, Susana L. Marchiano y Alejandro J. Arvia   | Oral   |
| D104 | NUEVAS ESTRATEGIAS EN LA DETECCIÓN DEL EVENTO DE HIBRIDACIÓN  | Abdel-Nasser KAWDE <sup>1</sup> , Ronen POLSKY <sup>1</sup> , Joseph WANG <sup>1</sup> y Gustavo A. RIVAS <sup>2</sup> | Oral   |
| D105 | <b>RETIRADO</b>   |  |        |
| D106 | COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DEL ACERO INOXIDABLE 304L BAJO LA INFLUENCIA DE BIOFILMS FOTOSINTÉTICOS EN AGUA DE MAR NATURAL      | D. M. Ruiz, S. Simison, y J.P. Busalmen.   | Poster |
| D107 | DISEÑO Y CARACTERIZACION DE NUEVAS ALEACIONES DE TIPO AB <sub>2</sub> FORMADORAS DE HIDRUROS METALICOS                            | A. VISINTIN, A. BONESI, H. PERETTI Y W. E. TRIACA  | Poster |
| D108 | MEJORAMIENTO DE LAS PROPIEDADES ELECTROCATALITICAS DE ALEACIONES FORMADORAS DE HIDRUROS POR ADICION DE Pt, Pd y Ni                | A. VISINTIN, D. BARSELINI, W. E. TRIACA, M. P. SORIAGA, C. Wang y A. J. Appleby  | Oral   |
| D109 | ESTUDIO DE LAS CARACTERISTICAS OPERATIVAS DE UNA BATERIA DE Ni-H <sub>2</sub> DE USO ESPACIAL BAJO CONDICIONES SIMULADAS DE VUELO | G. GARAVENTTA, A. BONESI, A. VISINTIN Y W.E. TRIACA  | Poster |
| D110 | NUEVOS ELECTRODOS PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO DE TEMPERATURA INTERMEDIA  | D.G. Lamas, G.E. Lascalea, R.E. Juárez, M.E. Rapp y N.E. Walsøe de Reca  | Oral   |
| D111 | CORROSIÓN BAJO TENSIÓN DE LATÓN EN SOLUCIONES DE NaNO <sub>2</sub>  | M. Graciela ALVAREZ, Patricia LAPITZ, Silvia A. FERNANDEZ y José R. GALVELE.   | Oral   |
| D112 | CARACTERISTICAS ELECTROQUIMICAS DE UNA PILA DE COMBUSTIÓN   | J.R. Casanova, H.J. Fasoli, J.I. Franco, A. Sanguinetti  | Poster |
| D113 | INTERACCIÓN DE FLUNITRAZEPAM CON MONOCAPAS DE FOSFOLÍPIDOS ADSORBIDAS EN UNA INTERFASE LÍQUIDO / LÍQUIDO                          | L.M.A. Monzón, L.M. Yudi.  | Poster |

**D1**  
**ORAL**

**COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE  
NITRATO REDUCTASA AUTOENSAMBLADA.  
ESTUDIOS ELECTROQUÍMICOS Y  
ELECTROACÚSTICOS**

Nancy F. Ferreyra<sup>1</sup>, Erica S. Forzani<sup>1</sup>, Liliane Coche-Guérante<sup>2</sup>, Pierre Labbé<sup>2</sup>,  
Ernesto J. Calvo<sup>3</sup>, Velia M. Solís<sup>1</sup>

1) INFIQC, Dpto. de Fisicoquímica, Fc. Ciencias Químicas, UNC 2) Laboratoire  
d'Electrochimie Organique et de Photochimie Rédox, Université Joseph Fourier,  
Francia 3) INQUIMAE, Fc. Ciencias Exactas y Naturales, UBA.

Fac. de Cs. Qs., Pab. Argentina - 1<sup>o</sup> Piso, 5000, Córdoba, Argentina.

E-mail: [ferreyra@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:ferreyra@fisquim.fcq.unc.edu.ar)

La Nitrato Reductasa (NR) es una enzima que cataliza el primer paso de la reducción de  $\text{NO}_3^-$  a  $\text{NO}_2^-$  y está constituida por tres sitios activos independientes: el FAD, el Citocromo b y el sitio molibdeno, donde interacciona el sustrato enzimático. Este último sitio puede ser regenerado artificialmente empleando moléculas con potenciales de reducción adecuados. Se han construido diversos biosensores con NR como elemento de reconocimiento y con mediadores artificiales en solución, sin embargo, hasta el momento, esta proteína no ha sido incorporada en autoensamblados. En este trabajo presentaremos los resultados obtenidos autoensamblado NR con un polímero electroquímicamente activo con capacidad regeneradora de la proteína, denominado poliviologeno (PV), sintetizado a tal fin. Se incluyen los resultados de estudios sobre el comportamiento electroquímico de PV, se evalúa la respuesta en función del número de capas autoensambladas y las propiedades catalíticas del sistema. A partir de los estudios realizados con microbalanza de cristal de cuarzo, se determinan las masas adsorbidas del polímero y de la proteína y se realiza un análisis cinético del proceso de adsorción.

**D2**

**INTERCAMBIO DE ELECTROLITO CON TRANSPORTE  
DE SOLVENTE EN LOS CAMBIOS DE VOLUMEN  
DURANTE LA CONMUTACION REDOX EN POLIANILINA**

L. Lizarraga, E. M. Andrade y F. V. Molina

INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas, UBA

Pabellon II, C. Universitaria, C1428EHA Buenos Aires, Argentina

E-mail: [fmolina@qi.fcen.uba.ar](mailto:fmolina@qi.fcen.uba.ar)

Los polímeros conductores de la familia de la polianilina (PANI) sufren cambios de volumen considerables en la oxidación-reducción del par leucoemeraldina/emeraldina. Se estudió el cambio de volumen que sufren películas gruesas de PANI (aprox. 200  $\mu\text{m}$  de espesor) -obtenidas por electropolimerización- durante ciclados lentos de potencial en  $\text{H}_2\text{SO}_4$  y  $\text{HClO}_4$ , ambos 1 y 3,7 M. Se comprueba que las películas de PANI recién obtenidas contienen una proporción importante de solución (fracción en volumen cercana a 0,6), y que el cambio de volumen durante el ciclado muestra un comportamiento similar al observado en la literatura para el intercambio iónico por medio de técnicas de deflexión de haz laser. El análisis de las curvas volumen/carga indica, suponiendo que la oxidación está acompañada principalmente por ingreso de aniones, un cambio del orden de 500-600  $\text{cm}^3/\text{mol}$  en ácido 1 M y de alrededor de 200  $\text{cm}^3/\text{mol}$  en medio 3,7 M. Estos resultados indican claramente que el ingreso de solvente acompañando los iones es importante, y que el fenómeno de hinchamiento/contracción del polímero debe interpretarse en términos del ingreso y egreso de solución de electrolito y no de intercambio de iones sin participación del solvente.

D3

## REGENERACIÓN DE LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE ELECTRODOS DE ORO EN LA DETECCIÓN DE TRANS RESVERATROL

**Adrián M. Granero, María A. Zón, Héctor Fernández**

**Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales. Universidad Nacional de Río Cuarto.**

Agencia Postal N° 3- (5800)- Río Cuarto, Córdoba

E-mail: granero.jg@hotmail.com

El resveratrol (trans-3,5,4'-trihidroxi estilbeno) (t-Res) es una fitoalexina sintetizada por diversas plantas. Este compuesto se encuentra en mayor cantidad relativa en la piel de las uvas, siendo éstas la fuente más importante de este antioxidante natural. La determinación cuantitativa del t-Res en diferentes matrices ha sido realizada en los últimos años empleando principalmente las técnicas cromatográficas, particularmente la cromatografía HPLC. Resultados previos obtenidos en nuestro laboratorio empleando el reactivo comercial pusieron de manifiesto que el mecanismo de reacción electroquímica del t-Res es complejo, con una marcada pasivación de la superficie del electrodo. Así, en este trabajo se muestran los resultados obtenidos a partir de la aplicación de un método de limpieza "in situ" de la superficie de un electrodo de oro, que permite la obtención de señales reproducibles durante la oxidación anódica de t-Res. Dicho método consiste en la aplicación de un programa de pulsos de potencial, uno a un potencial lo suficientemente positivo de manera de producir la formación de los correspondientes óxidos superficiales, y otro en la dirección negativa que permite reducir dichos óxidos y restablecer la actividad catalítica de la superficie metálica. Como medio de reacción se utiliza una solución compuesta por 20% ACN + 80% solución acuosa 0.1 M HClO<sub>4</sub>. Se construyen curvas de calibración empleando la voltametría de onda cuadrada como técnica electroanalítica con la finalidad de realizar la determinación cuantitativa del antioxidante. Se estima el límite de detección y demás parámetros analíticos de interés.

D4  
ORAL

## LA INTERFACE ORO|POLI-O-AMINOFENOL ESTUDIADA MEDIANTE LA TÉCNICA DE LA RESISTENCIA SUPERFICIAL

**R.I Tucce\***

**INIFTA, Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas.**

**Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.**

**Suc. 4, C.C. 16, (1900), la Plata, Argentina.**

**\*E-MAIL : [rtucce@inifta.unlp.edu.ar](mailto:rtucce@inifta.unlp.edu.ar)**

En este trabajo se estudió el proceso redox de un polímero electreactivo tal como el poli-o-aminofenol (POAF) mediante medidas de resistencia superficial. El electrodo de trabajo fue un film de POAP de espesor 60 nm depositado sobre una película de oro cuyo espesor ( $\phi_m$ ) es del orden del camino libre medio del electrón en este metal ( $l_m = 22$  nm). Tres variables externas fueron modificadas durante los experimentos: el espesor del film metálico,  $\phi_m$ , el anión de la solución en contacto con el polímero (perclorato, sulfato y bencensulfonato) y el pH de la misma. Los cambios de resistencia ( $\Delta R$ ) del film de oro durante el proceso redox del POAF fueron interpretados en términos de un efecto de dispersión electrónica donde la conversión de grupos amino a imino origina nuevos centros dispersores para los electrones de conducción del oro en la interfase oro|POAP. Los cambios  $\Delta R$  en función del potencial fueron correlacionados con el grado de oxidación ( $\theta_{ox}$ ) del polímero resultando, para distintos valores de  $\phi_m$ , una dependencia lineal ( $\Delta R \cdot \theta_{ox}$ ) vs  $\phi_m^{-2}$ , lo que permite interpretar los datos resistométricos sobre la base de la teoría del "efecto de tamaño". Los cambios  $\Delta R$  resultaron independientes del tipo de anión presente en el electrolito. Distribuciones de centros reducidos menos compactas son obtenidas a medida que el pH se incrementa.

D5

## ANÁLISIS ELECTROQUÍMICO DE RANITIDINA Y SU DETERMINACION EN MUESTRAS FARMACEUTICAS

José María García, Leandro C. Cáceres y Patricia I. Ortiz

INFIQC, Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina

E-mail: [portiz@fcq.unc.edu.ar](mailto:portiz@fcq.unc.edu.ar)

Resumen – La ranitidina actúa como una histamina antagonista receptor de  $H_2$  y se usa en el tratamiento de la hiperacidez gástrica y la ulceración péptica. Se han informado diferentes métodos para su determinación entre ellos espectrofotometría UV, polarografía y potenciometría. En el presente trabajo, se analiza el comportamiento electroquímico de ranitidina y además se establecen las condiciones óptimas para su determinación en un sistema de análisis por inyección en flujo (FIA) con detección amperométrica, el método se aplicó a la cuantificación de minoxidil en presentaciones farmacéuticas comerciales.

Se estudió el comportamiento electroquímico de ranitidina mediante voltamperometría cíclica con diferentes electrolitos soporte y a diferentes valores de pH. En general el voltamperograma no muestra algún proceso de oxidación en el barrido positivo de potencial, aunque durante el barrido negativo se observa un aumento de corriente a valores de potencial de aproximadamente 0,5 V, correspondiente a un proceso de reducción. Por otra parte, se optimizó la respuesta del electrodo en un sistema FIA-amperométrico, para ello se analizó la respuesta electroquímica en función de distintas variables tales como potencial aplicado, solución transportadora, tiempo, velocidad de flujo, etc.

D6  
ORAL

## EL PROCESO ELECTROQUÍMICO DE DEPOSITO DE NI SOBRE PELICULAS DELGADAS DE ORO ESTUDIADO MEDIANTE LA TECNICA DE LA RESISTENCIA SUPERFICIAL

M. Fonticelli, D. Posadas, R.I Tucceri\*

INIFTA, Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas.

Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

Suc. 4, C.C. 16, (1900), la Plata, Argentina.

\*E-MAIL :rtucce@inifta.unlp.edu.ar

En este trabajo se estudió el proceso de depósito de Ni(II) sobre películas delgadas de oro de 35 nm de espesor mediante voltamperometría cíclica y medidas de resistencia superficial. El depósito de níquel se realizó a partir de una solución 0.1 M  $KNO_3$  + 0.1 M  $KSCN$  +  $10^{-3}$  M  $NiSO_4$  empleando una velocidad de barrido de  $10^{-2}$  V  $s^{-1}$ . Mientras el límite positivo de potencial fue mantenido en 0.4 V (ECS), el límite de potencial negativo fue variado entre -0.3 y -0.8 V. Las cargas voltamperométricas de “stripping” fueron así correlacionadas con la respuesta resistométrica en el mismo rango de potenciales ( $\Delta R/R$  vs.  $Q_{stp}$ ). La máxima carga de “stripping” obtenida fue  $Q_{stp} = 330 \mu C cm^{-2}$ . Sin embargo, una dependencia lineal  $\Delta R/R$  vs.  $Q_{stp}$  es sólo obtenida hasta valores de carga del orden de  $120 \mu C cm^{-2}$ . A bajos cubrimientos del adsorbato, la resistencia superficial del sustrato (Au) depende linealmente de la concentración superficial  $\Gamma$  del adsorbato, según,  $\Delta R/R = (a + b Z^2)\Gamma$ , donde  $Z = Z_{ads} - Z_{subst}$  si el adsorbato actúa como una impureza sustitucional y  $Z = Z_{ads}$  si actúa como una impureza intersticial.  $Z_{ads}$  y  $Z_{subst}$  son las valencias del adsorbato y sustrato, respectivamente. El Ni actúa como impureza sustitucional para la red superficial del oro.

D7

**DETECCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE LA FITOTOXINA  
CERCOSPORÍN MEDIANTE TÉCNICAS  
ELECTROANALÍTICAS EN EXTRACTOS DE HOJAS DE  
MANI**

**Nancy C. Marchiando, María A. Zón, Héctor Fernández**

**Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y  
Naturales. Universidad Nacional de Río Cuarto.**

**Agencia Postal N° 3- (5800)- Río Cuarto, Córdoba.**

**E-mail: nmarchiando@exa.unrc.edu.ar**

El Cercosporin (Cer) es una toxina no-específica producida por hongos del género *Cercospora*, los que causan enfermedades a distintos granos. Resultados previos obtenidos en nuestro laboratorio pusieron en evidencia que Cer se adsorbe específicamente sobre la superficie de un electrodo de carbono vitreo, si el medio de reacción tiene un alto contenido acuoso (20% acetonitrilo (ACN) + 80% solución acuosa 1 M HClO<sub>4</sub>). Bajo estas condiciones, la voltametría de redisolución se empleó acoplada a la voltametría de onda cuadrada para realizar la determinación cuantitativa de Cer a partir de medios simulados. Aquí se presentan y discuten los resultados obtenidos cuando la metodología previamente mencionada, con ligeras modificaciones, se empleó para detectar y cuantificar Cer en extractos naturales obtenidos a partir de hojas de mani infectadas por la fitotoxina. Las experiencias electroanalíticas permitieron detectar la presencia de Cer en el extracto natural, la que fue corroborada mediante cromatografía en capa fina y cromatografía HPLC, aunque la etapa de cuantificación presentó algunos problemas de solubilidad que deben ser optimizados en el futuro.

D8

**ESTUDIOS ELECTROQUÍMICOS DE LA MICOTOXINA  
ZEARALENONA OBTENIDA A PARTIR DE ARROZ  
FERMENTADO POR INOCULACIÓN DE *FUSARIUM*  
*GRAMINEARUM***

**Patricia G. Molina\*, María A. Zón\*, Sofía Chulze\*\*, Héctor Fernández\***

**\* Departamento de Química, \*\* Departamento de Microbiología e Inmunología,  
Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales. Universidad Nacional de  
Río Cuarto. Agencia Postal N° 3- (5800)- Río Cuarto, Córdoba.**

**E-mail: pmolina@exa.unrc.edu.ar**

La zearalenona (ZEN), también conocida como toxina F-2, es una micotoxina estrogénica producida principalmente por *F. graminearum* y *F. culmorum*, especies de hongos que pueden contaminar maíz. La determinación cuantitativa de ZEN en diferentes matrices ha sido realizada en los últimos años empleando principalmente la cromatografía HPLC. Resultados previos obtenidos en nuestro laboratorio empleando el reactivo comercial pusieron de manifiesto que es posible la oxidación electroquímica de esta micotoxina sobre electrodos de carbono vitreo y que bajo determinadas condiciones experimentales, se adsorbe específicamente sobre la superficie de dichos electrodos. Sobre la base de los estudios realizados con el reactivo comercial, en el presente trabajo se presentan y discuten los estudios relacionados a la detección de ZEN obtenida a partir de arroz fermentado por inoculación de *Fusarium graminearum* (productor de ZEN) y se comparan los resultados obtenidos utilizando ZEN separada de la matriz mediante cromatografía de capa fina (TLC) y la determinada directamente sin separación previa de la matriz. Dichos resultados indican que es posible la detección electroquímica de ZEN prescindiendo de una técnica separativa previa. La detección se realiza utilizando voltametría de onda cuadrada (VOC) con redisolución adsorbtiva. Como medio de reacción se utiliza una solución compuesta por 20% ACN + 80% solución acuosa 0.1 M HClO<sub>4</sub>.

D9

## ESTUDIO DEL MECANISMO DE DESCARGA Y PERMEACIÓN DE HIDRÓGENO EN PALADIO

P. Bruzzoni, R.M. Carranza, J.R. Collet Lacoste, E.M. Welti.

Comisión Nacional de Energía Atómica, Departamento de Materiales. Dpto. Materiales,

CNEA, Av. Gral. Paz 1499, (B1650KNA), San Martín, Buenos Aires, Argentina

E-mail: welti@cnea.gov.ar

En el presente trabajo se estudian la descarga y permeación de hidrógeno en láminas delgadas de paladio utilizando la técnica de Espectroscopía de Impedancia Electroquímica (EIS). Los resultados experimentales se interpretan a través de un modelo teórico que permite determinar los parámetros fisicoquímicos y cinéticos que describen al sistema. Se miden simultáneamente dos funciones de transferencia: la impedancia electroquímica, que relaciona el potencial aplicado con la corriente catódica, y la función de transferencia de permeación, que relaciona la corriente de permeación de hidrógeno con la corriente catódica. Estas dos funciones de transferencia están relacionadas entre sí a través del mecanismo de descarga y transporte de hidrógeno en el metal. En el presente trabajo se presentan los resultados obtenidos sobre láminas de paladio brillante y láminas de paladio con un depósito de negro de paladio con el fin de mostrar la diferencia que se observa al aumentar el área específica en la superficie de entrada. Se discuten también los distintos resultados obtenidos sobre paladio brillante cuando se cambia el electrolito de carga de NaOH a LiOH. Está probado experimentalmente que el litio se introduce dentro de la red metálica del paladio. La fuerte interacción atractiva entre el litio y el hidrógeno produce cambios en las formas de los diagramas experimentales. Estos estudios fueron realizados a diferentes temperaturas y a potenciales inferiores a la formación de hidruro (fase  $\alpha'$ ).

D10  
ORAL

## EFICIENCIA DE INHIBIDORES DE CORROSIÓN EN MEDIOS SALINOS CON DIÓXIDO DE CARBONO

López, D.A., Simison, S.N. y Rosso S.

División Corrosión, INTEMA, Facultad de Ingeniería, UNMdP.

J.B. Justo 4302, Mar del Plata. CP B7608FDQ.

E-mail: dalopez@mdp.edu.ar

El presente trabajo apunta a estudiar la influencia de la microestructura de un acero al carbono de utilización frecuente en tuberías de producción en la industria del petróleo, sobre la formación de productos de corrosión y su interacción con los inhibidores en un medio salino desoxigenado saturado con CO<sub>2</sub>. Se utilizan muestras con dos condiciones microestructurales extremas obtenidas por diferentes tratamientos térmicos: [a] austenizado a 890 °C y enfriado en horno (recocido) y [b] austenizado a 890 °C, enfriado en agua y revenido a 700 °C por una hora. Las películas superficiales se generan en celdas electroquímicas termostatazadas a 40 °C con agitación a baja velocidad, en solución 5 % NaCl, pH = 6, saturada en CO<sub>2</sub> y con concentraciones de O<sub>2</sub> por debajo de 40 ppb. Este último requisito es indispensable para la formación de productos de corrosión en condiciones que simulen las de servicio en producción de petróleo. Se estudia el efecto del agregado N-(3-aminopropil)-imidazol (API) y dos compuestos de formulación comercial a base de imidazolinas como inhibidores de corrosión.

Se utilizan técnicas electroquímicas de aplicación *in situ*, tales como impedancia electroquímica (EIS) y resistencia de polarización lineal (Rp), para caracterizar el comportamiento del material frente a la corrosión en las condiciones mencionadas y realizar el seguimiento de la formación de películas superficiales. El estudio ex-situ de dichas películas superficiales obtenidas luego de 96 h de inmersión se realiza mediante técnicas de análisis de superficie como SEM y XPS.

D11

**UN NUEVO MODELO DE CARACTERIZACION ELECTRODOS DE HIDRURO METÁLICO POR ESPECTROSCOPIA DE IMPEDANCIA ELECTROQUIMICA**

**A. BONESI, B. CASTRO, S. REAL, A. VISINTIN, W. E. TRIACA.**

**Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), UNLP**

**Suc. 4, C.C. 16 (1900), La Plata, Argentina**

**E-mail: bonesi@inifta.unlp.edu.ar**

Se presenta un modelo fisicoquímico mediante el cual se interpreta la respuesta de impedancia de electrodos de hidruro metálico utilizados en baterías alcalinas recargables, a diferentes estados de descarga. En el modelo, la función de transferencia tiene en cuenta la naturaleza porosa del electrodo considerandose una conductividad finita tanto para el material sólido como para el electrolito. La reacción de absorción/desorción de H tiene lugar en la superficie de partículas de aleación del tipo  $AB_3$ , y  $AB_5$ , esféricas, de diámetro promedio. Este proceso de intercalación es descrito en términos de un mecanismo cinético para la absorción de H acoplado a la difusión de H en el material de la aleación. El estado de descarga del material (SOD), está relacionado con las condiciones de contorno necesarias para resolver las ecuaciones de transporte. En el diagrama de impedancia es posible distinguir tres regiones de frecuencias asociadas: un semicírculo capacitivo atribuido a la resistencia de transferencia de carga en paralelo con la capacidad interfacial, un semicírculo vinculado a la relajación del intermediario de H adsorbido y la difusión de H en el material da origen

D12

**INFLUENCIA DEL POLIETILENGLICOL (PEG) EN EL PROCESO DE ELECTRODEPOSICIÓN DE COBRE**

**Ana L. Portela, Gabriela I. Lacconi y Manuel López Teijelo**

**INFIQC, Dpto. de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, UNC**

**Pabellón Argentina, Ala 1, 2<sup>do</sup> piso, Cdad. Universitaria (5000) Córdoba, Argentina**

**E-mail: analau@mail.fcq.unc.edu.ar**

Los compuestos polietoxilados son aditivos de uso frecuente para la obtención de depósitos brillantes de cobre y de zinc. Sin embargo, su efecto es siempre analizado en depósitos obtenidos en presencia de iones cloruro, otro componente frecuente en los baños comerciales de deposición.

En el presente trabajo se estudia el mecanismo de deposición de cobre a partir de soluciones débilmente ácidas en presencia de PEG. En estas condiciones, se obtienen depósitos brillantes y adherentes que muestran la efectividad del aditivo en ausencia de cloruros para la deposición de cobre. Los resultados muestran una inhibición de la corriente de reducción debido al bloqueo parcial del electrodo por adsorción del PEG. Se evidencia además un segundo proceso de reducción previo a la deposición masiva de cobre. Además, se analiza en forma comparativa el comportamiento electroquímico de compuestos orgánicos con grupos funcionales similares sobre diferentes sustratos.

A partir de resultados electroquímicos se propone un mecanismo de acción del PEG como abrillantador y agente de mojado en el proceso de electrodeposición de cobre.

D13

**ELECTRODEPOSICION DE POLIPIRROL SOBRE  
ELECTRODOS DE ALUMINIO EN SOLUCIONES  
ALCALINAS**

**Silvana. B. Saidman**

**Instituto de Ingeniería Electroquímica y Corrosión (INIEC). Departamento de  
Ingeniería Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253.**

**8000 – Bahía Blanca.**

**E-mail: ssaidman@criba.edu.ar**

Películas conductoras, estables y adherentes de polipirrol pueden obtenerse sobre electrodos de Al en solución 0,1 M  $\text{NO}_3^-$ , pH 12 mediante voltametría cíclica ó a potencial constante. El óxido formado a este pH inhibe parcialmente la disolución del metal sin impedir la oxidación del monómero. Estas películas fueron caracterizadas mediante técnicas ópticas y electroquímicas. Durante el proceso de oxidación-reducción del polímero en solución de  $\text{NO}_3^-$ , pH 12 tiene lugar principalmente el intercambio de  $\text{NO}_3^-$ . Sin embargo, si el proceso se realiza en presencia de otros aniones (sulfato, acetato, oxalato) el transporte principal es el de  $\text{OH}^-$ , originándose la disolución del metal base que tiene lugar simultáneamente con el proceso redox del polímero. Las películas electrogeneradas pueden ser oxidadas y reducidas aún en 0.1 M  $\text{HNO}_3$ , presentando en este medio un comportamiento redox similar al de las películas generadas en medio ácido. La presencia del polímero no evita la disolución del Al en soluciones de pH 13.

La comparación entre los resultados obtenidos empleando Al y carbono vítreo como sustrato para la electropolimerización permite postular que iones  $\text{Al}^{3+}$  provenientes de la disolución del metal base participan en el proceso redox del polímero.

D14

**COMPORTAMIENTO REDOX DE POLIPIRROL  
ELECTRODEPOSITADO SOBRE CARBONO VITREO EN  
SOLUCIONES ALCALINAS**

**Silvana. B. Saidman**

**Instituto de Ingeniería Electroquímica y Corrosión (INIEC). Departamento de  
Ingeniería Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253.**

**8000 – Bahía Blanca.**

**E-mail: ssaidman@criba.edu.ar**

El comportamiento electroquímico de películas de polipirrol electrogeneradas sobre carbono vítreo en solución 0.1 M  $\text{NO}_3^-$ , pH 12 fue investigado mediante voltametría cíclica y medidas de potencial a circuito abierto. La eficiencia para la reacción de polimerización es similar a la encontrada en medio ácido. La forma y variación de la respuesta voltamperométrica en el tiempo depende del tipo de anión presente en la solución electrolítica y del pH. A partir de estos resultados se analiza la participación de iones en el proceso redox del polímero. La participación de aniones tales como  $\text{NO}_3^-$  ó  $\text{Cl}^-$  es dominante, aunque también ocurre el intercambio de  $\text{OH}^-$ . La inserción de  $\text{Na}^+$  tiene lugar durante la reducción del polímero. En soluciones de mayor pH tiene lugar casi exclusivamente el intercambio de  $\text{OH}^-$ . En solución 0.01 M  $\text{NaOH}$  ó en soluciones alcalina que contienen aniones que no se incorporan a la película polimérica ocurre el intercambio de  $\text{OH}^-$ . El polímero puede ser oxidado y reducido en medio ácido sin perder actividad electroquímica. Películas de polipirrol pueden también depositarse en solución 0.1 M  $\text{SO}_4^{2-}$ , pero en este caso el transporte de  $\text{OH}^-$  ocurre exclusivamente durante el proceso redox del polímero.

**D15**

**ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DEL CAMPO ELÉCTRICO EN LA ADSORCIÓN DE METALES CON ESTRUCTURA (1x1) MEDIANTE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS.**

**María C. Giménez, Sergio A. Dassie y Ezequiel P. M. Leiva.**

**INFOC. Unidad de Matemática y Física, Fac. de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba.(C.P.5000) Córdoba, Argentina.**

**E-mail: [cecilia@umf.fcq.unc.edu.ar](mailto:cecilia@umf.fcq.unc.edu.ar)**

Estudios experimentales del fenómeno de deposición a subpotenciales muestran que hay ciertos pares de metales que presentan dicho fenómeno, mientras que los cálculos energéticos correspondientes no lo predicen. Esta estabilización adicional de la monocapa metálica puede deberse a diversos factores, entre ellos: efecto del solvente, efecto de aniones, efecto del campo externo aplicado, etc..

En el presente trabajo se estudia mediante cálculos de primeros principios la influencia de un campo eléctrico externo aplicado a sistemas de tipo  $M_1/M_2(111)$ , donde  $M_1$  y  $M_2$  son dos metales de naturaleza diferente. Estos cálculos son realizados a partir del formalismo de DFT, utilizando el programa SIESTA, el cual emplea un conjunto de bases localizadas para representar los orbitales de Kohn-Sham y pseudopotenciales apropiados para evitar la inclusión de los electrones de "core" en los cálculos.

Se observa que, dependiendo de los metales involucrados, la adsorción de la monocapa se estabiliza bajo la influencia de campos eléctricos negativos o positivos. Proponemos que dicha estabilización adicional a campos pequeños está ligada a la diferencia de funciones trabajo de los metales  $M_1$  y  $M_2$ .

**D16**

**II.- ESTUDIO DE LA ELECTROOXIDACION DE 1,1'-NAFTIDINA EN MEDIO ACUOSO Y FORMACIÓN DE PELÍCULAS SOBRE ELECTRODOS DE PLATINO**

**J. Gavotti, F. D'Eramo, L. Sereno and A. H. Arévalo\***

**Dpto. de Química. Facultad de Ciencias Exactas, Fisico-Químicas y Naturales. Universidad Nacional de Río Cuarto. Enlace Rutas 8 y 36. Km 601. Río Cuarto.**

**Córdoba. \*E-mail: [aarevalo@exa.unrc.edu.ar](mailto:aarevalo@exa.unrc.edu.ar)**

Las electroreacciones constituyen un buen método para la síntesis de nuevos materiales dado que poseen ciertas ventajas: son sistemas limpios y permiten alcanzar altos rendimientos. Dentro de estas, la electrooxidación de aminas aromáticas se ha demostrado que conducen a la formación de dímeros y posteriormente oligómeros o polímeros que se adhieren a la superficie del electrodo base dando origen a los conocidos electrodos modificados (EM). En nuestro laboratorio se llevaron a cabo estudios sobre electrooxidaciones de aminas aromáticas mono y polinucleares, en medios acuosos y no acuosos. Se pudo establecer que las propiedades físicas, químicas y mecánicas de estos materiales y por lo tanto su aplicabilidad están íntimamente relacionadas con las condiciones en que se realiza la síntesis de los mismos. Por lo tanto es necesario hacer un estudio sistemático de las variables de reacción a los fines de lograr su optimización. En el presente trabajo, se describe la electrooxidación de 1,1'-naftidina en medio acuoso en función de variables físicas, químicas y electroquímicas del sistema, tales como pH, temperatura, velocidad de barrido de potencial, potencial de inversión, etc. Se observa la obtención de un producto adherido a la superficie del electrodo de Pt que crece en acuerdo con el avance de la electroreacción. Por otra parte, se muestra una correspondencia entre la cantidad de monómero oxidado y la cantidad de polímero obtenida. El rendimiento de electropolimerización, medido como  $Q_{\text{monómero}}/Q_{\text{polímero}}$ , depende de variables tales como el pH y la T, a velocidad de barrido y concentración de monómero constantes. En base a los resultados obtenidos se propone un mecanismo de electrooxidación y de formación del polímero.

D17

## ESTUDIOS COMPUTACIONALES DE NANOESTRUCTURACIÓN INDUCIDA POR DEFECTOS

**N. B. Luque, M. G. Del Pópolo, E. P. M. Leiva**

**Unidad de Matemática y Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad  
Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria**

**E-mail: [nluque@fcq.unc.edu.ar](mailto:nluque@fcq.unc.edu.ar)**

La nanoestructuración electroquímica en superficies de sólidos ha sido emprendida usando básicamente tres tipos de técnicas: técnicas de depósito inducido por punta, donde una pequeña cantidad de metal es transferido desde una punta de STM a la superficie, técnicas de depósito inducido por campo, donde la distribución inhomogénea del campo eléctrico entre la punta de STM y el sustrato es empleado para generar nanoestructuras, y técnicas de depósito inducido por defectos, donde son creados defectos en la superficie, los cuales pueden actuar como centro de nucleación. En el presente trabajo hacemos alusión al tercer tipo de nanoestructuración por medio de simulaciones computacionales. En el campo experimental es digno de mencionar el trabajo realizado por Xia et al., donde se depositaron conglomerados de Cu en huecos de tamaño nanométrico efectuados en superficies de Au (111). En el presente trabajo modelamos dos aspectos de este fenómeno. Por un lado, analizamos las condiciones para la creación de los defectos en la superficie, por medio de un modelo de continuo. Este incluye el análisis de la distribución del campo eléctrico en la interfase y la influencia del electrolito. Por otro lado, presentamos los resultados de modelos de simulación atomística para el crecimiento de estructuras superficiales en estos defectos bajo diferentes condiciones.

D18

## CAPACIDAD DE COMPLEJAMIENTO EN SISTEMAS MODELO Y EN MEDIOS ACUÁTICOS NATURALES

**Y. S. Minaberry y G. J. Gordillo**

**DOIAOF, INQUIMAE, FCEN – Universidad de Buenos Aires, C. Universitaria,**

**Pabellón II, Buenos Aires (1428), Ceretti, A. Zalts y S. A. Ramírez**

**ICI – Universidad Nacional de General Sarmiento, J.M.Gutierrez 1150, Los Polvorines  
(1613), Prov. de Buenos Aires. Email: [gabriel@qi.fcen.uba.ar](mailto:gabriel@qi.fcen.uba.ar)**

El contenido total de metales, uno de los parámetros establecidos en la normativa vigente sobre calidad de aguas y efluentes cloacales e industriales, es una forma pobre de evaluar el riesgo potencial para la salud humana y el ambiente. Desde este punto de vista, es importante determinar la biodisponibilidad de los metales frente a organismos vivos y su distribución en el ambiente acuático, lo cual requiere conocer su especiación, fuertemente influenciada por la presencia de materia orgánica de origen natural (ácidos fúlvicos y húmicos) y antropogénico.

Se estudió el comportamiento electroquímico de sistemas modelo conteniendo complejos de Cd(II) con ligandos policarboxílicos (NTA - EDTA - DTPA). Se aplicaron técnicas de voltametría de preconcentración electrolítica (redisolución anódica) en combinación con barridos de potencial de onda cuadrada (SWASV) o lineal (LSASV). Se determinaron parámetros fisicoquímicos que caracterizan estos sistemas.

Los resultados obtenidos, para este amplio rango de valores de constantes condicionales de formación, permiten establecer criterios para la evaluación de la especiación y la capacidad de complejamiento de medios acuáticos naturales. Se aplicó esta metodología a la caracterización de aguas naturales con diferente nivel de contaminación antropogénica.

**D19**

**ANALISIS DE TECNICAS ELECTROQUIMICAS PARA LA DETERMINACION DE LA VELOCIDAD DE CORROSION DEL ACERO EN ESTRUCTURAS DE HORMIGON ARMADO**

**E.A.Arva, W.Morris y G.S.Duffó**

**Comisión Nacional de Energía Atómica – Depto. Materiales Av. Gral Paz 1499, (1650) San Martín, Buenos Aires, E-mail: [duffo@cnea.gov.ar](mailto:duffo@cnea.gov.ar)**

La determinación de la velocidad de corrosión de las armaduras es de importancia para efectuar un diagnóstico y evaluar la vida útil de una estructura de hormigón armado. La técnica no destructiva más empleada es la de resistencia a la polarización lineal (RPL), en la que la velocidad de corrosión es calculada a partir de la ecuación de Stern-Geary:  $i_{corr} = B/R_p$ , donde  $R_p$  es la resistencia a la polarización y B una constante que depende de las pendientes de Tafel anódicas y catódicas. En el presente trabajo se realizaron mediciones sobre probetas de acero embebidas en cemento Portland normal en diversas condiciones de exposición, y se emplearon las técnicas de espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS), trazado de curvas de polarización potenciodinámicas (CPP) y mediciones de pérdida de peso. Luego de 150 días de exposición, las barras de refuerzo de un hormigón armado sometido a ambiente de laboratorio permanecen al estado pasivo, mientras que las parcialmente sumergidas en soluciones de NaCl 3,5% y Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 5%, y las sometidas a carbonatación acelerada presentan un comportamiento activo. Las mediciones de  $R_p$  por medio de la técnica de polarización lineal o por espectroscopia de impedancia electroquímica producen valores que difieren entre si en hasta un orden de magnitud. Finalmente, se deduce que la predicción de  $i_{corr}$  a partir de las mediciones de  $R_p$ , sólo es factible con un error dentro del orden de magnitud dependiendo de las condiciones de exposición.

**D20**

**MECANISMO DE LA CORROSION BAJO TENSION DE MATERIALES H.C.P. EN SOLUCIONES DE YODO**

**S.Farina, G.S.Duffó y J.R.Galvele**

**Comisión Nacional de Energía Atómica – Depto. Materiales Av. Gral Paz 1499, (1650) San Martín, Buenos Aires**

**E-mail: [farina@cnea.gov.ar](mailto:farina@cnea.gov.ar)**

Se estudió la susceptibilidad a la corrosión bajo tensión de materiales hep: titanio, circonio y una de sus aleaciones, Zircaloy-4, en soluciones de yodo en diversos alcoholes (10 g/L), por medio de la realización de ensayos de tracción a velocidad lenta de deformación hasta rotura del espécimen o interrumpidos antes de que ello ocurra. En todos los sistemas se encontró corrosión bajo tensión, pero previo a la propagación de las fisuras se determinó la existencia de ataque intergranular asistido por tensiones, debido a disolución anódica de los bordes de grano. El paso controlante del proceso global es la difusión del yodo complejoado con la molécula de metanol al fondo de la fisura en propagación. Se demostró que es necesaria la rotura local de la película pasivante para inducir corrosión bajo tensión en estos materiales y este fenómeno es producido por el efecto químico del yodo sobre los óxidos de titanio y circonio. Cuando la profundidad del ataque intergranular alcanza determinado valor, se produce la transición a un modo de propagación transgranular, que es el verdadero fenómeno de corrosión bajo tensión. Los resultados fueron analizados a la luz del mecanismo de corrosión bajo tensión basado en la movilidad superficial. En el presente caso, los compuestos deletéreos formados, y que inducen a la corrosión bajo tensión son TiI<sub>4</sub> y ZrI<sub>4</sub>. Los valores de velocidad de propagación de fisuras predichos por el mencionado mecanismo son consistentes con los encontrados experimentalmente.

D21  
ORAL**EL EFECTO DEL *pH* SOBRE EL PROCESO REDOX DEL POLI-O-AMINOFENOL ESTUDIADO MEDIANTE MEDIDAS DE RESISTENCIA SUPERFICIAL****R.I Tucceri\*****INIFTA, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas.****Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.****Suc. 4, C.C. 16, (1900), la Plata, Argentina.****\*E-MAIL : [rtucce@inifta.unlp.edu.ar](mailto:rtucce@inifta.unlp.edu.ar)**

En este trabajo se estudió el efecto del *pH* sobre el proceso redox de un polímero electroactivo tal como el poli-o-aminofenol (POAF) mediante medidas de resistencia superficial y voltamperometría cíclica. El electrodo de trabajo fue un film de POAF de 60 nm de espesor depositado sobre una película de oro cuyo espesor es del orden del camino libre medio del electrón en este metal. El *pH* de la solución externa en contacto con el POAF (NaClO<sub>4</sub> + HClO<sub>4</sub>) fue variado entre 1 y 6.5. A valores de *pH* > 1, el POAF no se reduce completamente, lo que se demuestra por una continua atenuación del cambio resistométrico durante la conversión desde el estado oxidado al reducido del polímero, a medida que el *pH* aumenta. Los cambios de resistencia en función del potencial  $\Delta R-E$ , a distintos valores de *pH*, fueron correlacionados con el grado de reducción ( $\theta_{\text{Red}}-E$ ) del polímero. La dependencia  $\Delta R-\theta_{\text{Red}}$  resulta lineal, sin embargo su valor se incrementa a medida que el *pH* aumenta. Esto indicaría que a medida que el *pH* aumenta no sólo el número de centros reducidos decrece sino que también su distribución en la interface oro/POAF se hace menos compacta. El pobre grado de swelling del polímero a altos *pH*s hace que operen fuerzas repulsivas entre los sitios reducidos, adoptando estas configuraciones más extendidas que bajos *pH*.

D22

**ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD DE TETRACICLINAS EN SOLUCIÓN ACUOSA****R.A. Fernández y S.A. Dassie****Dpto. de Físicoquímica - Fac. de Cs. Químicas – Univ. Nacional de Córdoba****Pabellón Argentina. Ala 1. Piso 2. Ciudad Universitaria****E-mail: [sdassie@mail.fcq.unc.edu.ar](mailto:sdassie@mail.fcq.unc.edu.ar)**

Las tetraciclinas son una familia de antibióticos de amplio espectro de acción y son utilizadas tanto en el hombre como en animales productores de alimentos para el tratamiento de diversas enfermedades. Se conoce que la utilización en exceso de estos antibióticos provoca que las bacterias adquieran resistencia a los mismos. Además, la baja estabilidad de estos fármacos posibilita la aparición de productos de degradación en diversos alimentos tóxicos para el hombre (ej. 4-epianhidrotetraciclina). El objetivo principal de este trabajo es el estudio de la degradación de tetraciclina (TC) y oxitetraciclina (OTC) en soluciones acuosa a diferentes valores de *pH*. Para tal fin, se realizó un estudio comparativo a partir de resultados espectrofotométricos y electroquímicos. Se utilizó voltametría cíclica aplicada a interfases líquidas y sobre gota de mercurio con preconcentración por adsorción. Las medidas sobre interfases líquidas permiten obtener información tanto del analito como de sus productos de degradación. A partir de la energía libre de transferencia se obtiene la hidrofobicidad y del perfil de corriente la carga neta asociada a la especie.

La voltametría cíclica aplicada sobre gota de mercurio permitió la detección de distintas especies con diferentes características redox y de adsorción.

**D23**

**TRANSFERENCIA COMPETITIVA DE UNA MEZCLA DE  
CATIONES A TRAVÉS DE INTERFASES LIQUIDAS**

**C. Arrua y S.A. Dassie**

**Dpto. de Fisicoquímica - Facultad de Ciencias Químicas – Universidad  
Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria**

**E-mail: sdassie@mail.fcq.unc.edu.ar**

El estudio electroquímico de la transferencia de carga a través de la interfase entre dos electrolitos no miscibles (itics) brinda la posibilidad de obtener información respecto del mecanismo de transferencia de carga y de la selectividad de un ligando a partir de la determinación de potenciales y corrientes de transferencia.

En los últimos años, el estudio de la transferencia de un único cation asistida por la presencia de un ligando ha sido ampliamente informada en la literatura. Cuando dos o más cationes diferentes están presentes en la fase acuosa, nos encontramos con una transferencia competitiva de estos cationes por el ligando presente en fase orgánica. Esta situación se corresponde directamente con lo que ocurre en un electrodo selectivo a iones (ise). La fase orgánica que contiene el ligando es homologa a la membrana del ise y la fase acuosa caracteriza la solución problema.

En este trabajo se presenta un estudio de la transferencia una mezcla de cationes  $M_1z_1+$  y  $M_2z_2+$  asistido por un ligando presente en fase orgánica. Es posible observar, en determinadas condiciones experimentales, la transferencia de una carga neta igual a  $|z_1 - z_2|$  a través de la interfase. Los resultados obtenidos son contrastados con simulaciones digitales.

**D 24 RETIRADO**

**D25**  
**ORAL**

**REACCIONES DE INTERCAMBIO DE LIGANDOS Y  
CATIONES A TRAVÉS DE INTERFASES LIQUIDAS**

**J.I. Garcia<sup>a</sup>, R.A. Iglesias<sup>b</sup> y S.A. Dassie<sup>a</sup>**

**<sup>a</sup>Unidad de Matemática y Física - <sup>b</sup>Dpto. de Físicoquímica - Facultad de  
Ciencias Químicas – Universidad Nacional de Córdoba  
Ciudad Universitaria**

**e-mail: [riglesias@mail.fcq.unc.edu.ar](mailto:riglesias@mail.fcq.unc.edu.ar)**

Los procesos de transferencia de iones a través de interfases líquidas asistidos por ligandos neutros o cargados han sido ampliamente estudiados en los últimos años. En general, los sistemas estudiados se aplican a la existencia de un ligando y un catión. Los mecanismos generales están divididos en dos grupos: formación de complejos en fase acuosa seguido de la transferencia de la especie formada o la transferencia del ion con la posterior formación de complejos interfaciales con ligandos hidrofóbicos. Por otra parte, en el área de los electrodos selectivos es vital la coexistencia de más de un catión como así también es frecuente la utilización de mezclas de ionóforos.

En este trabajo, mediante técnicas de simulación digital de perfiles voltamétricos se aborda el estudio de la transferencia de una mezcla de cationes asistidos por un ligando y la transferencia de un catión asistido por una mezcla de ligandos. Se presentan para ambos sistemas, diagramas de zonas en función de parámetros accesibles experimentalmente para las distintas reacciones de transferencia de carga, como así también criterios voltamétricos que permiten la identificación de los procesos que ocurren.

**D26**

**REACCIONES QUÍMICAS ACOPLADAS A LA  
TRANSFERENCIA DE IONES A TRAVÉS DE INTERFACES  
LÍQUIDAS**

**Sergio A. Dassie, Rodrigo A. Iglesias y Ana M. Baruzzi**

**Dpto. de Físicoquímica - Fac. de Cs. Químicas – Univ. Nacional de Córdoba  
Pabellón Argentina. Ala 1. Piso 2. Ciudad Universitaria**

**E-mail: [riglesias@mail.fcq.unc.edu.ar](mailto:riglesias@mail.fcq.unc.edu.ar)**

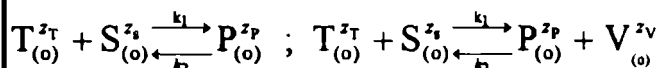
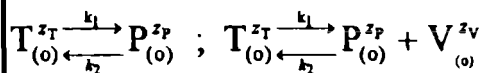
El estudio de reacciones químicas en fase homogénea acopladas a la transferencia de carga a través de una interface líquida reviste gran importancia en el ámbito de la electrocatalisis y la catalisis heterogénea.

En esta presentación se muestra la simulación numérica de perfiles voltamétricos y de absorbancia interfacial correspondientes al mecanismo que se detalla a continuación:

**Transferencia heterogénea:**



**Posible reacción acoplada:**



Las simulaciones se llevaron a cabo usando diferenciación finita explícita mediante el método de la caja.

Se analiza el comportamiento del sistema para diferentes condiciones de simulación y se muestran criterios de identificación de la reacción química acoplada. Los resultados teóricos son contrastados con la transferencia de un colorante catiónico a través de la interface agua/1,2-dicloroetano acoplada a una reacción química fotoinducida en la fase orgánica.

**D27**

**ANÁLISIS ELECTROQUIMICO DE MINOXIDIL Y SU DETERMINACION EN MUESTRAS FARMACEUTICAS**

**Maria Valeria Pfaffen y Patricia I. Ortiz**

**INFIQC, Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina.**

**E-mail: mpfaffen@mail.fcq.unc.edu.ar**

Resumen - El minoxidil (6-[1-Piperidinil]pyrimidine-2,4-diamine 3-oxide) es una aminotriazina que por su gran eficiencia resulta muy útil en tratamiento de hipertensiones graves y para el tratamiento de la alopecia androgénica. Diferentes métodos han sido informados para su determinación en distintas muestras, sin embargo la mayoría están acoplados a un sistema de separación cromatográfico. En el presente trabajo, se analiza el comportamiento electroquímico de minoxidil y además se establecen las condiciones óptimas para su determinación en un sistema de análisis por inyección en flujo (FIA) con detección amperométrica, el método se aplicó a la cuantificación de minoxidil en presentaciones farmacéuticas comerciales.

Se estudió el comportamiento electroquímico de minoxidil mediante voltamperometría cíclica con diferentes electrolitos soporte. En general se observan varios procesos de oxidación/reducción, que están controlados por difusión. Por otra parte, se optimizó la respuesta del electrodo en un sistema FIA-amperométrico, para ello se analizó la respuesta electroquímica en función de distintas variables tales como potencial aplicado, solución transportadora, tiempo, velocidad de flujo, etc.. Las determinaciones con FIA amperométrico de la muestra comercial se realizaron con las condiciones óptimas establecidas que son solución reguladora de fosfato, pH 7,30, un potencial de trabajo de 0,800 V, una velocidad de flujo de 0,74 mLmin<sup>-1</sup> y con una frecuencia de 120 inyecciones hora<sup>-1</sup>.

**D28**

**ANÁLISIS ELECTROQUIMICO DE RANITIDINA Y SU DETERMINACION EN MUESTRAS FARMACEUTICAS**

**José María García, Leandro C. Cáceres y Patricia I. Ortiz**

**INFIQC, Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina**

**E-mail: portiz@fcq.unc.edu.ar**

Resumen - La ranitidina actúa como una histamina antagonista receptor de H<sub>2</sub> y se usa en el tratamiento de la hiperacidez gástrica y la ulceración péptica. Se han informado diferentes métodos para su determinación entre ellos espectrofotometría UV, polarografía y potenciometría. En el presente trabajo, se analiza el comportamiento electroquímico de ranitidina y además se establecen las condiciones óptimas para su determinación en un sistema de análisis por inyección en flujo (FIA) con detección amperométrica, el método se aplicó a la cuantificación de minoxidil en presentaciones farmacéuticas comerciales.

Se estudió el comportamiento electroquímico de ranitidina mediante voltamperometría cíclica con diferentes electrolitos soporte y a diferentes valores de pH. En general el voltmaprograma no muestra algún proceso de oxidación en el barrido positivo de potencial, aunque durante el barrido negativo se observa un aumento de corriente a valores de potencial de aproximadamente 0,5 V, correspondiente a un proceso de reducción. Por otra parte, se optimizó la respuesta del electrodo en un sistema FIA-amperométrico, para ello se analizó la respuesta electroquímica en función de distintas variables tales como potencial aplicado, solución transportadora, tiempo, velocidad de flujo, etc..

D29

## CONDUCCION IONICA EN HALOGENUROS DE PLATA DOPADOS CON MONTMORILLONITA

J.C. Bazán<sup>1</sup>, Nelson J. García, Alicia Robledo y Carla V. Spetter.

<sup>1</sup> Laboratorio de Físicoquímica Inorgánica, Dpto. de Química, Universidad Nacional del Sur. Avda. Alem 1253. (8000) Bahía Blanca. Argentina.

<sup>1</sup> Investigador C.I.C, Provincia Buenos Aires.

e-mail: [jcbazan@criba.edu.ar](mailto:jcbazan@criba.edu.ar)

Se estudió la conductividad iónica de yoduro y bromuro de plata dopados por coprecipitación con cantidades de montmorillonita variables entre 0,2 y 12 por ciento en peso, en el rango de temperatura de 20 °C a 400°C, encontrándose un notable aumento de la misma en la zona de baja temperatura, en comparación con los electrolitos sólidos puros. Los resultados obtenidos para el "composite" de bromuro de plata puede interpretarse cualitativamente en base al modelo de dopado heterogéneo (J.Maier, Prog.Solid State Chem., 23 (1995) 1289-1292) en el que el efecto se atribuye a un aumento de la concentración de defectos responsables de la conducción iónica por una interacción interfacial, en los que los sitios activos de la arcilla atraen cationes de la estructura del cristal iónico, creando así nuevas vacancias. En el caso del yoduro de plata, si bien podría aceptarse una interpretación similar, se encuentra como más probable la estabilización -inducida por el dopante- de la fase metaestable  $\gamma$ -AgI, de mayor conductividad que la forma termodinámicamente estable a baja temperatura. En ambos casos no se detectó contribución electrónica a la conductividad.

D30

## CARACTERIZACIÓN DE LAS PELÍCULAS SUPERFICIALES FORMADAS SOBRE COBRE Y LATÓN AL ALUMINIO EN AGUA POTABLE

Valcarce, M. B., Vázquez M. V. y Rosso S.

División Corrosión, INTEMA, Facultad de Ingeniería, UNMdP.

J.B.Justo 4302, Mar del Plata. CP B7608FDQ.

E-mail: [mvalca@fi.mdp.edu.ar](mailto:mvalca@fi.mdp.edu.ar)

Se realizó un estudio comparativo de las películas superficiales formadas sobre cobre y latón al aluminio en agua potable sintética (pH 7.6), cuya composición refleja una composición promedio del agua potable de la ciudad de Mar del Plata. Las técnicas electroquímicas fueron complementadas con espectros de reflectancia diferencial "in situ" de los óxidos formados a distintos potenciales. Los potenciales de circuito abierto para cobre y latón se estabilizan luego de 2 horas en contacto con la solución en valores de -0.001V y -0.035V respectivamente. Los resultados indican que sobre cobre la película pasiva crecida a potencial libre luego de 2 hs, esta formada por Cu<sub>2</sub>O. Las voltametrías cíclicas muestran tres picos catódicos que han sido asignados a la reducción de CuO, Cu<sub>2</sub>O y especies solubles de Cu(I). El cobre se ataca localizadamente a potenciales más positivos que 0.055V. Sobre latón la película pasiva crecida a potencial libre luego de 2 hs consiste de una combinación de Cu<sub>2</sub>O y compuestos de Zn(II). Las voltametrías cíclicas de este material muestran dos picos que pueden ser asignados a la reducción de Cu<sub>2</sub>O y de compuestos de Zn(II). El latón se ataca localizadamente a potenciales más positivos que 0.05V. Las curvas de reducción de las películas crecidas a potencial libre muestran, en términos generales, buena coincidencia entre el número y posición de los picos asignados en las voltametrías. De la comparación entre las corrientes de los picos de las curvas de reducción potenciodinámicas, surge que la película se reduce con mayor dificultad sobre latón. Se espera confirmar esta tendencia con ensayos de resistencia a la polarización.

**D31**

**EFFECTO DE LA CORRIENTE Y LA CONCENTRACION  
ANALISIS DE LOS CAMBIOS MORFOLOGICOS EN ECD**

**Graciela A. GONZÁLEZ<sup>2</sup>, Guillermo MARSHALL<sup>1</sup>, Fernando MOLINA<sup>2</sup>**

**<sup>1</sup>Departamento de Computación, FCEN, UBA - <sup>2</sup> INQUIMAE, FCEN, UBA**

**Ciudad Universitaria (1428) Buenos Aires –**

**E-mail: [fmolina@qi.fcen.uba.ar](mailto:fmolina@qi.fcen.uba.ar)**

En este trabajo se presenta el estudio de los efectos de la concentración de electrolito y de la densidad de corriente aplicada en electrodeposición en celdas delgadas (ECD). Los experimentos fueron realizados en condiciones galvanostáticas variando la concentración del electrolito y la densidad de corriente aplicada. Para el análisis y seguimiento de los frentes de concentración y convectivos se utilizó la técnica de Schlieren. Las variaciones de morfología se evaluaron a través del número de ramas por unidad de longitud y su densidad aparente. Los experimentos revelan que las variaciones de concentración no modifican la velocidad del frente anódico, pero sí afectan fuertemente la velocidad relativa entre el frente catódico y el depósito, observándose una inversión a medida que aumenta la concentración empleada. Se observan también deformaciones del frente gravitoconvectivo catódico debido al movimiento por electroconvección. Estos hechos van acompañados de pronunciadas diferencias en las morfologías del depósito obtenido, al punto de llegar a anularse la formación ramificada. En cuanto a la corriente aplicada, se observa un valor umbral por debajo del cual no se observa formación ramificada. Al aumentar la corriente por encima de dicho valor se acelera el avance de los frentes gravitoconvectivos anódico y catódico, resultando ambos perfectamente simétricos. Al mismo tiempo, aumenta el número de ramas por unidad de longitud del electrodo y a su vez estas son mucho más ramificadas. Los resultados se analizan con ayuda de un modelo teórico para el transporte iónico, que describe los modos difusivo, migratorio y convectivo en el fluido bajo los efectos del campo eléctrico. Las ecuaciones están descriptas en términos de números adimensionales, destacándose los más relevantes en estos experimentos.

**D32**

**FOTOLUMINISCENCIA DE POLIMEROS DE ARILAMINAS**

**P. S. Antonel, E. M. Andrade y F. V. Molina**

**INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas, UBA**

**Pabellon II, C. Universitaria, C1428EHA Buenos Aires, Argentina**

**E-mail: [fmolina@qi.fcen.uba.ar](mailto:fmolina@qi.fcen.uba.ar)**

Los polímeros conductores de la familia de la polianilina (PANI) presentan fotoluminiscencia (fluorescencia) en el estado reducido (leucoemeraldina) cuando absorben luz en el rango 300-330 nm. Esta fotoluminiscencia desaparece durante la oxidación a emeraldina, ya que es desactivada ("quenched") por la presencia de portadores de carga. En este trabajo se estudió en primer lugar la respuesta fotoluminiscente de películas de PANI -obtenidas por electropolimerización sobre platino- en el estado reducido y medio fuertemente ácido, y su modificación a medida que se aumenta el potencial oxidando al polímero. El estudio se complementa con mediciones de reflectancia y absorbancia para interpretar cuantitativamente la respuesta. La desactivación se relaciona con la transición aislador/conductor del polímero. También se investigó la fotoluminiscencia de películas de poli-2-metoxianilina (PMOA), polímero que presenta una forma conductora y otra redox, en composición variable dependiendo de las condiciones de polimerización. Se observa que la forma conductora es similar a la PANI en su respuesta de fluorescencia en tanto que la forma redox tiene escasa o nula emisión.

D33

**ESTUDIO DE LA DEPOSICION DE PLATA A PARTIR DE  
IODURO DE PLATA DISUELTO EN YODURO DE  
POTASIO**

**María C. S. de Maffi y Julio C. Bazán<sup>1</sup>**

**Laboratorio de Físicoquímica Inorgánica, Dpto. de Química, Universidad Nacional del Sur. Avda. Alem 1253. (8000) Bahía Blanca. Argentina.**

**<sup>1</sup>Investigador C.I.C, Provincia Buenos Aires.**

**e-mail: [jcbazan@criba.edu.ar](mailto:jcbazan@criba.edu.ar)**

El yoduro de plata se disuelve en soluciones de yoduro de potasio bajo la forma de complejos de la fórmula general  $AgI_n^{(n-1)-}$  y es de esperar que en el proceso de reducción catódica del ion plata el proceso difusional juegue un rol importante. De allí, la reacción se estudió primeramente utilizando un disco rotatorio de plata con el que se obtuvieron corrientes límite bien definidas, si bien la representación de  $j_L$  vs.  $\omega^{1/2}$  no sigue exactamente la ecuación de Levich sino que muestra un término extra que se interpreta como la contribución de una previa reacción de formación del ente a reducir. Por otra parte, y a fin de eliminar la contribución difusional, se determinaron curvas corriente-potencial aplicando pulsos de corriente de corta duración ( $10^{-2}$  s -  $10^{-3}$  s), las que se linealizan en representaciones semilogarítmicas, que también pueden asignarse a un control por reacción química, ya que la velocidad de la transferencia de carga es muy grande. Aplicando el concepto de capa de reacción para ambos casos, se pudieron determinar la fórmula y el coeficiente de difusión de la especie difundiente, y, conociendo la constante de equilibrio correspondiente a la reacción de formación de la especie reactiva a partir de la especie difundiente, se obtuvieron las constantes de velocidad de las reacciones directa e inversa.

D34

**ESTUDIO ELECTROQUÍMICO DE AMINOÁCIDOS  
PRESENTES EN TOXINAS MICROCISTINAS.**

**D. A. Baletka, M. I. Manzanares Cuello, O. R. Cámara.**

**INFIQC. Dpto de Físicoquímica, Fac. de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba – Ala 1 Pabellón Argentina, Cdad. Universitaria - 5000 - Córdoba.**

**E-mail: [ocamara@mail.fcq.unc.edu.ar](mailto:ocamara@mail.fcq.unc.edu.ar)**

En los últimos tiempos, dada la contaminación de las aguas con altos contenidos de nitrógeno y fósforo (aguas eutróficas), se han producido episodios de desarrollo de cianobacterias tóxicas o algas verdes-azules en cuerpos de aguas dulces, incluyendo reservorios de agua para el consumo humano, informando víctimas humanas y de animales domésticos y salvajes. Las Microcistinas son hepatotoxinas producidas por varios géneros de cianobacterias. Pertenecen a una familia de heptapéptidos que se distinguen por dos aminoácidos variables, X y Z, los cuales se encuentran en las posiciones 2 y 4 respectivamente. La microcistina más común es la LR, donde Leucina (L) y Arginina (R) están en posiciones 2 y 4, respectivamente. Otras microcistinas son la RR, YR (Tirosina) y LW (Triptofano). Estudios electroquímicos sobre microcistina en solución han indicado la posibilidad de que los aminoácidos Arginina, Leucina, Tirosina y Triptofano sean los responsables de las respuestas obtenidas por voltametría cíclica. En este trabajo se estudia el comportamiento electroquímico de Arginina, Leucina, Tirosina y Triptofano empleando diferentes materiales de electrodos (carbono vitreo, oro y platino), y en medios de diferentes pH, como ser  $H_2SO_4$  0,5 M (pH menor a 1) y buffer  $H_2PO_4^-/HPO_4^{2-}$  de pH 6,7. Todos los valores de potencial registrados están referidos al electrodo de  $Ag/AgCl/KCl_{(sat)}$ . Los estudios experimentales se realizaron aplicando la técnica electroquímica de voltamperometría cíclica. También se presentan algunos resultados de voltametría cíclica sobre Microcistina obtenida a partir de algas provenientes del lago San Roque.

**D35**

**ESTUDIO COMPARATIVO DE MATRICES ENZIMÁTICAS PARA SU USO EN UN BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO DE OXALATO**

**M. Calderón\*, M. C. Strumia\* R. Capra y A. M. Baruzzi**

**INFIQC. Dpto de Fisicoquímica, \*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas**

**Universidad Nacional de Córdoba, (C.P. 5000) Córdoba, Argentina.**

**E-mail: [abaruzzi@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:abaruzzi@fisquim.fcq.unc.edu.ar)**

La determinación de oxalato es muy importante para el estudio de litiasis renal. La inmovilización de las enzimas en electrodos enzimáticos ha solucionado los problemas de los métodos basados en el empleo de enzimas solubles ya que permite el uso de pequeñas cantidades de enzima y se puede controlar mejor a los interferentes. Cuando la enzima está inmovilizada, la velocidad de reacción depende no sólo de la concentración de sustrato, sino también de las constantes cinéticas ( $K_m$  y  $v_{max}$ ) y de la difusión, las cuales a su vez están directamente influenciadas por el tipo de inmovilización. En el presente trabajo se prepararon distintas matrices poliméricas inmovilizando la enzima oxalato oxidasa por entrecruzamiento químico o atrapamiento físico entre dos membranas adecuadas, que además controlan la llegada al electrodo de interferentes electroquímicamente activos.

En la preparación de las matrices se utilizaron albúmina, carbopol y mucina en distintas proporciones. Para las mezclas unidas químicamente se usó una carbodiimida (EDC) o glutaraldehído como agente activante. Las condiciones óptimas de síntesis y entrecruzamiento se evaluaron mediante curvas de calibración y estudio de estabilidad. Las matrices fueron caracterizadas por FT-IR e índice de hinchamiento en agua.

Las matrices covalentemente unidas Enzima-Carbopol-Mucina y Enzima-Carbopol mostraron resultados muy aceptables desde el punto de vista electroquímico, ya que la respuesta eléctrica fue lineal y se mantuvo estable en el tiempo analizado.

**D36**

**TRANSFERENCIA DEL COMPLEJO Al(III)-OFLOXACINA A TRAVÉS DE LA INTERFASE AGUA | 1,2 - DICLOROETANO MODIFICADA CON UNA MONOCAPA DE LÍPIDOS**

**A.I. Azcurra, L.M. Yudi y A.M. Baruzzi**

**INFIQC. Dpto de Fisicoquímica, Fac. de Ciencias Químicas,**

**Universidad Nacional de Córdoba, (C.P. 5000) Córdoba, Argentina.**

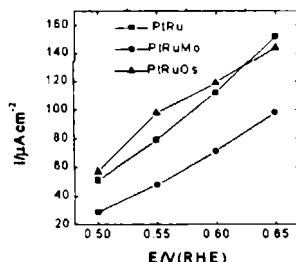
**E-mail: [abaruzzi@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:abaruzzi@fisquim.fcq.unc.edu.ar)**

En el presente trabajo se analiza el efecto de una monocapa de lípidos adsorbida en la interfase agua | 1,2 DCE sobre la transferencia de ofloxacina, antibiótico fluorquinolónico, y de sus complejos con Al(III). Estudios previos en ausencia de lípido indicaron que la transferencia del antibiótico es controlada por difusión mientras que la transferencia del complejo está acoplada a un proceso de adsorción en la interfase. El análisis resulta interesante si se considera la disminución de la absorción intestinal de estos antibióticos en presencia de este catión. El empleo de lípidos de distinta naturaleza y carga, y de electrolitos soporte de diferente densidad de carga mostró respuestas voltamétricas diferentes para los procesos difusionales y para los de adsorción. Mientras que el colesterol no modificó los perfiles I-E, los fosfolípidos zwitteriónicos produjeron diferencias que pueden explicarse considerando las áreas moleculares hidratadas de los fosfolípidos en la interfase agua | aire. En presencia de un fosfolípido aniónico, se observaron cambios que indicarían una competencia entre los cationes de los electrolitos soporte y la ofloxacina, libre o acomplejada, por la cabeza polar del fosfolípido. Puede concluirse que los procesos de transferencia y adsorción son afectados por la estructura interfacial de la monocapa la cual es fuertemente dependiente de la naturaleza del lípido y de la densidad de carga del catión del electrolito soporte de la fase acuosa.

D37

**ELECTRODO CATALITICO DE POLIANILINA**T. Kessler<sup>#</sup>, A.M. Castro Luna\*<sup>#</sup>Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Avda. Del Valle 5737 (7400) Olavarría<sup>\*</sup>INIFTA, Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas. Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.Suc. 4, C.C. 16, (1900), la Plata, Argentina.\*E-MAIL :castrolu@inifta.unlp.edu.ar

Mediante la aplicación de una señal periódica de potencial se prepararon electrodos catalíticos multimetálicos para la oxidación de metanol depositando Pt-Ru y un tercer componente metálico-Mx ( Mx=Os o Mo) sobre un electrodo de polianilina de 0.5  $\mu$  de espesor. Las soluciones usadas contenían  $9 \times 10^{-3}$  M  $H_2PtCl_6$ ,  $1.5 \times 10^{-2}$  M  $RuCl_3$ , y  $2.6 \times 10^{-4}$  M  $OsO_4$ , o  $4 \times 10^{-4}$  M  $(NH_4)_6Mo_7O_{24}$ , en 0.1 M  $HClO_4$ . Las densidades de corriente medidas para la oxidación de metanol en el rango de potencial 0.45-0.60 V fueron mayores cuando Os es el tercer componente metálico agregado.



D38

**ANÁLISIS DE ENROFLOXACINA MEDIANTE TÉCNICAS ELECTROQUÍMICAS Y DE HPLC**S. Sereno<sup>a</sup>, J. M. Marioli<sup>b</sup>, L. E. Sereno<sup>b</sup><sup>a</sup>Facultad de Ingeniería; <sup>b</sup>Facultad de Ciencias Exactas Físicoquímicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto; ruta 36, km 601; 5800 - Río Cuarto; Argentina.E-mail: ssereno@ing.unrc.edu.ar

La enrofloxacina es un antibiótico quinolónico usada en terapéutica animal. Inhibe el crecimiento bacteriano por interferencia con la enzima DNA girasa, necesaria para la síntesis del DNA.

La determinación de enrofloxacina y sus residuos en matrices biológicas está basada en la separación de los analitos mediante cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) en modo de fase reversa. El método de detección más empleado es el de absorción UV-Visible y se ha informado el uso de detección por emisión de fluorescencia. Sin embargo, la detección electroquímica es una alternativa a considerarse dada su alta sensibilidad, selectividad, fácil uso y bajo costo. En consecuencia, se realizó el estudio electroquímico de enrofloxacina sobre electrodos de carbón vítreo a fin de desarrollar metodología para su determinación en alimentos por HPLC utilizando detección electroquímica.

Así, se estudió la respuesta voltamétrica de oxidación de EFX, se realizaron voltagramas hidrodinámicos, se optimizó el potencial de trabajo y el pH para la detección electroquímica a fin de obtener máxima sensibilidad, reproducibilidad y selectividad. Se realizó una curva de calibración de EFX para estudiar el intervalo lineal y el límite de detección bajo las condiciones experimentales más favorables. La sensibilidad de la detección electroquímica de EFX fue comparada con la correspondiente a la detección UV-visible de dicho compuesto, y se pudo observar que el sistema de detección electroquímica posee una sensibilidad molar algo mayor que el sistema de detección UV-visible., y si bien con la técnica adoptada para la extracción de EFX desde leche vacuna no existe un 100 % de la recuperación, se estima que es posible la cuantificación de pequeñas cantidades de EFX.

D39

### INFLUENCIA DE $\text{Fe}^{2+}$ EN LA ELECTRODEPOSICIÓN DE $\text{MnO}_2$

A.S. Pilla, M.M.E. Duarte, J.F. Mandará y C.E. Mayer

Instituto de Ingeniería Electroquímica y Corrosión - Universidad Nacional del Sur,  
Avda. Alem 1253. (8000) Bahía Blanca. Argentina. E-mail: mduarte@criba.edu.ar

En el desarrollo de un proceso de recuperación de manganeso de pilas agotadas, se ha encontrado que los lixiviados ácidos de las mismas contienen manganeso, cinc y concentraciones menores de otros iones metálicos electroactivos, como Fe, Cu, Hg, Pb, Cd, Ni, etc. En este trabajo se estudia la influencia de  $\text{Fe}^{2+}$  en la obtención de DME sobre distintos materiales de electrodo, en diferentes condiciones de concentración y convección.

Se utilizaron soluciones de  $\text{MnSO}_4$  0,1 M +  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,5 M con concentraciones variables de  $\text{FeSO}_4$  y  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ , entre 0,001 y 0,2 M. Se emplearon electrodos estacionarios y rotatorios de carbono vítreo y tela de fibra de grafito. Se utilizaron técnicas electroquímicas convencionales: voltametría cíclica, barridos lineales de potencial, cronoamperometría y cronopotenciometría.

Para cuantificar la cantidad de óxido formada, se utilizó la carga del pico de reducción del óxido de manganeso. En un electrodo de carbono vítreo, dicho pico disminuye cuando aumenta la concentración de  $\text{Fe}^{2+}$ , y la reducción es más pronunciada a bajas velocidades de barrido de potencial o con rotación del electrodo. El efecto se atribuye a la reacción  $2\text{Fe}^{2+} + \text{MnO}_2 + 4\text{H}^+ \rightarrow 2\text{Fe}^{3+} + \text{Mn}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$ , que es lo suficientemente rápida para provocar la disolución del óxido aún a potenciales donde debería encontrarse protegido anódicamente y cuya velocidad está controlada por el transporte de  $\text{Fe}^{2+}$  hacia la interfaz. Con electrodos de fibra de grafito sin convección forzada el efecto es menos notable, porque el  $\text{Fe}^{2+}$  no alcanza a penetrar en el interior del material, oxidándose en la superficie externa del electrodo. Al aumentar la convección por rotación se observa nuevamente una notable reducción en la cantidad de DME formado.

D40

### ALTOS VALORES DE FOTOCORRIENTE PRODUCIDOS POR PD-PORFIRINA SOBRE $\text{SnO}_2$ NANOESTRUCTURADO Y EN FILMS DE LANGMUIR-BLODGETT

Miguel Gervaldo, Maria Elisa Milanesio, César Marchiando, Luis Otero, Edgardo N. Durantini, Juana J. Silber y Leonides E. Sereno.

Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto,  
Agencia Postal 3. 5800 Río Cuarto. Córdoba, Argentina.

E-mail: mgervaldo@exa.unrc.edu.ar

En el presente trabajo se sintetizaron metaloporfirinas de distintos niveles de energía del primer estado singlete y distintas propiedades redox. Estos sistemas fueron utilizados en la autoadsorción sobre semiconductores nanoestructurados de  $\text{SnO}_2$  y en la formación de depósitos organizados de Langmuir-Blodgett sobre ITO (óxido de indio dopado con estaño) con el fin de realizar estudios fotoelectroquímicos sobre ellos. Las porfirinas fueron sintetizadas por el método de condensación de dipirrometano con aldehído y catalizada por ácido. Las metaloporfirinas fueron obtenidas tratando la porfirina ácido con los respectivos acetatos metálicos. Se observó en todos los casos fotocorrientes anódicas cuyo espectro coincide con el espectro de absorción del colorante, indicando que las porfirinas fotosensibilizan los electrodos y extienden su respuesta a la región visible del espectro. La porfirina metalizada con Pd (II) demostró ser la más efectiva en la generación de fotocorrientes, obteniéndose rendimientos cuánticos de alrededor del doble del valor de la porfirina sin metalizar. Los estudios fotoelectroquímicos de películas de Langmuir-Blodgett sobre ITO demostraron que estos sistemas también producen fotocorrientes cuando son iluminados en la zona de longitudes de onda donde absorbe el pigmento.

**D41**

**FOTOSENSIBILIZACION DE PELÍCULAS DE SnO<sub>2</sub> POR PARTE DE UNA DIADA PORFIRINA-PORFIRINA ELECTRON-DONOR ACEPTOR**

**Miguel Gervaldo, Maria Elisa Milanesio, Luis Otero, Edgardo N. Durantini, Juana J. Silber y Leonides E. Sereno.**

**Departamento de Química. Universidad Nacional de Río Cuarto. Agencia Postal 3. 5800 Río Cuarto. Córdoba, Argentina. E-mail: [mgervaldo@exa.unrc.edu.ar](mailto:mgervaldo@exa.unrc.edu.ar)**

Se ha utilizado una diada asimétrica porfirina-porfirina (ZnP-P) como receptor de luz en la sensibilización espectral de electrodos semiconductores de óxido nanocristalino. Este sistema molecular contiene unidades estructurales con diferentes propiedades redox y energía de los estados singletes, que lo hacen capaz de producir un efecto antena asociado a transporte de cargas. Además la inyección heterogénea fotoinducida de cargas se encuentra favorecida por la orientación preferencial de la molécula sobre la superficie del semiconductor, debido a la presencia de un grupo carboxilo libre en la subunidad P. Existe una total concordancia entre el espectro de absorción y el de fotocorriente de los electrodos ITO/SnO<sub>2</sub>/ZnP-P, demostrando que la excitación de cualquiera de los monómeros resulta en la inyección de un electrón en la banda de conducción del semiconductor con similar rendimiento cuántico. Por otra parte, el análisis de la fluorescencia de la diada y la unidad P adsorbidas sobre SiO<sub>2</sub> y SnO<sub>2</sub> demuestra que los rendimientos de inyección de cargas desde el estado excitado de ambos colorantes son similares, por lo que se propone que el aumento del efecto fotoeléctrico observado en la diada con respecto a los monómeros por separado se debe a la cinética relativamente lenta de recombinación de cargas del estado ZnP<sup>+</sup>-P<sup>-</sup>-SnO<sub>2</sub>(e). La arquitectura de este diseño molecular permite aprovechar un colorante como receptor de luz y dador secundario de electrones en el proceso de conversión de energía, imitando de esta forma a la fotosíntesis natural.

**D42**

**PROPIEDADES FOTOELÉCTRICAS DE Zn(II) PORFIRINA-C<sub>60</sub> CON USO POTENCIAL EN CELDAS SOLARES**

**Maria Elisa Milanesio, Miguel Gervaldo, Luis Otero, Edgardo N. Durantini, Juana J. Silber y Leonides E. Sereno.**

**Departamento de Química. Universidad Nacional de Río Cuarto. Agencia Postal 3. 5800 Río Cuarto. Córdoba, Argentina.**

**E-mail: [mmilanesio@exa.unrc.edu.ar](mailto:mmilanesio@exa.unrc.edu.ar)**

En el sistema supramolecular Zn(II) Porfirina-C<sub>60</sub> (ZnP-C<sub>60</sub>) la capacidad dadora de electrones de la porfirina se encuentra acrecentada por la presencia de los grupos metoxi en la periferia del macrociclo y por la formación del complejo con Zn(II). La emisión de fluorescencia de la porfirina se encuentra fuertemente inhibida cuando la misma forma parte de la diada. Los datos termodinámicos de ZnP-C<sub>60</sub> revelan que este sistema tiene una alta capacidad para formar estados de separación de carga intramolecular fotoinducidos. Esto es confirmado mediante fotólisis en estado estacionario en la presencia de metilviologenio como aceptor de electrones. También se observa que la inhibición de fluorescencia de la porfirina por parte del C<sub>60</sub> es dependiente de la polaridad del solvente, lo que indica la presencia de un mecanismo de desactivación adicional al de transferencia de energía singlete-singlete. La diada ZnP-C<sub>60</sub> genera efectos fotoeléctricos desde el estado excitado de ambas subunidades, actuando como sensibilizador espectral de semiconductores de óxido nanoestructurado de ancho band-gap. Debido a que la transferencia directa de electrones entre el estado singlete de fulceno y la banda de conducción del óxido no es energéticamente posible, se propone un mecanismo alternativo de generación de efectos fotoeléctricos que involucra la formación previa del estado de separación de cargas ZnP<sup>+</sup>-C<sub>60</sub><sup>-</sup>.

D43

**DESARROLLO DE UN METODO ELECTROQUIMICO  
PARA LA DETERMINACION DE ACIDO SALICILICO EN  
FORMULACIONES FARMACEUTICAS DE ACIDO  
ACETILSALICILICO**

**Torriero A. A. J.<sup>1</sup>, Luco J. M.<sup>1</sup>, Sereno L.<sup>2</sup>, Raba J.<sup>1</sup>.**

**<sup>1</sup> Departamento de Química Analítica. Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia.  
Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco y Pedernera (5700) San Luis.**

**<sup>2</sup> Departamento de Química y Física. Universidad Nacional de Río Cuarto. Agencia  
postal Nro. 3. (5800)- Río Cuarto. Córdoba**

**E-mail: sereno@exa.unrc.edu.ar**

El ácido salicílico es una impureza común del ácido acetilsalicílico y su determinación resulta de interés en el control de calidad de formulaciones farmacéuticas que poseen al ácido acetilsalicílico como compuesto mayoritario. Si bien esta determinación puede ser realizada con un método colorimétrico, el método electroquímico compite con aquella y a veces con mayor precisión. En este trabajo se estudió el mecanismo de oxidación electroquímica del ácido salicílico y a partir de estos datos se implementó una técnica para la cuantificación del ácido salicílico que se encuentra impurificando formulaciones farmacéuticas de ácido acetilsalicílico.

Este método es simple, sensible, preciso y rápido; en el cual no hay pasos de extracción ni evaporación y puede ser usado fácilmente en laboratorios de control de calidad para la determinación de ácido acetilsalicílico en muy pequeñas concentraciones.

D44

**COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE  
ELECTRODOS POLICRISTALINOS DE PLATA EN  
PRESENCIA DE SULFURO.**

**Oscar A. Oviedo, María F. Juárez, Verónica Brunetti y Manuel López Teijelo  
INFIQC- Dpto. de Físicoquímica, Fac. Cs. Químicas, Univ. Nacional de Córdoba.  
Pabellón Argentina, Ala derecha, 2do. piso, Ciudad Universitaria, Córdoba.**

**E-mail: brunetti@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

La adsorción de moléculas orgánicas y de iones sobre superficies de electrodos es un tema de particular interés en estudios de electrocatalisis y corrosión. La formación de monocapas autoensambladas con moléculas orgánicas que contienen al grupo SH<sup>-</sup> (por ej. tioles) es un sistema excelente para el estudio básico de procesos interfaciales que tienen aplicación en electroquímica, en la fabricación de biosensores y en recubrimientos que inhiben la corrosión. Las interacciones sustrato-adsorbato y adsorbato-adsorbato son las responsables del comportamiento superficial de estas especies.

El objetivo de la presente comunicación es analizar el papel que juega el grupo de anclaje de este tipo de moléculas (S) en los procesos de autoensamblado. Se estudia la respuesta electro-química de electrodos policristalinos de plata en soluciones que contienen sulfuro. En primer lugar se analiza la dinámica en los primeros estadios de autoensamblado de S sobre el metal. Los procesos de adsorción/desorción de estas monocapas se estudian variando la concentración del electrolito, las condiciones electroquímicas de formación (velocidad de barrido, potencial de corte anódico y catódico, etc.) y el pretratamiento del electrodo. Por otra parte, se muestra la caracterización de los procesos de electroformación y electrorreducción de películas masivas de Ag<sub>2</sub>S empleando barridos triangulares de potencial, pulsos de potencial e impedancia electroquímica

**D45**

**ESTUDIO ELECTROQUÍMICO Y ELIPSOMÉTRICO DE LA DISOLUCIÓN DE PELÍCULAS ANÓDICAS DE  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  EN ELECTROLITOS ACUOSOS**

**Valeria C. Fuertes, Omar E. Linarez Pérez, Manuel A. Pérez y Manuel López Teijelo**  
**INFIQC, Depto. de Físicoquímica, Fac. de Cs. Qcas., Univ. Nacional de Córdoba,**  
**Pab. Argentina, Ala 1, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba.**  
**E-mail: vfuertes@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

El crecimiento y estabilidad de películas de  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  obtenidas por anodizado del metal base fueron estudiados bajo condiciones potenciodinámicas y galvanostáticas. El comportamiento anódico obtenido puede ser descripto en base al crecimiento de las películas y su disolución química en el medio de formación. Para caracterizar ambos procesos, se llevaron a cabo experimentos electroquímicos (potenciodinámicos, galvanostáticos y espectroscopía de impedancia electroquímica (EIE)) conjuntamente con mediciones de elipsometría *in situ*. A fin de determinar la dependencia de la estabilidad de las películas, se emplearon soluciones de diferente composición ( $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ,  $\text{Cl}^-$ , etc.) y pH, analizándose el rol desempeñado por los aniones del medio de formación. Para electrolitos poco agresivos ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$  1M y 0,1M), la información de EIE permite la caracterización estructural y dieléctrica de las películas. Para la caracterización de los procesos que tienen lugar durante la disolución química del óxido a circuito abierto, se analizó el comportamiento óptico de las películas bajo condiciones de polarización anódica (campo eléctrico de  $0,5 \text{ MV cm}^{-1}$ ) y a circuito abierto (campo eléctrico cero).

**D46**  
**ORAL**

**CARACTERIZACIÓN DEL CRECIMIENTO Y DEL PROCESO DE CARGA/DESCARGA DE PELÍCULAS DELGADAS DE ÓXIDO DE MANGANESO**

**Beatriz A. López de Mishima<sup>#</sup> y Manuel López Teijelo**  
**INFIQC- Dpto. de Físicoquímica, Fac. Cs. Químicas, Univ. Nacional de Córdoba**  
**Pabellón Argentina, Ala derecha, 2do. piso, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba**  
<sup>#</sup> **Instituto de Ciencias Químicas, Fac. de Agronomía y Agroindustrias, Univ. Nac. de**  
**Sgo. del Estero, Belgrano (S) 1912, 4200 Sgo. del Estero**  
**E-mail: mlopez@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

El óxido de manganeso electrolítico es un excelente material de electrodo y es la forma más adecuada como material activo en celdas alcalinas de manganeso. El principal problema que limita la recargabilidad, está originado en cambios estructurales irreversibles que acompañan el proceso de oxidación/reducción en soluciones acuosas. En este trabajo se caracterizan el crecimiento y la respuesta durante el ciclado de películas de óxido de manganeso en medio alcalino, preparadas a partir de  $\text{Mn}^{2+}$  por pulsos potencioestáticos o galvanostáticos, o por oxidación de películas de  $\text{Mn}(\text{OH})_2$  obtenidas por precipitación química. Las películas presentan propiedades anisotrópicas, aunque las películas delgadas de  $\text{MnO}_2$  (hasta ca. 200 nm) pueden ser analizadas en base a modelos isotrópicos con constantes ópticas independientes del espesor. Durante el proceso de electro-reducción, la respuesta óptica muestra una disminución del índice de refracción y del coeficiente de extinción, acompañado de un incremento de espesor. Por otra parte, durante el ciclado se produce una pérdida progresiva de carga asociada con la formación de especies inactivas. El análisis de los resultados electroquímicos y ópticos, permite formular un modelo para interpretar los fenómenos irreversibles obtenidos durante ciclos sucesivos de carga/descarga.

D47

**CINÉTICA Y MECANISMO DEL CRECIMIENTO DE PELÍCULAS ANÓDICAS SOBRE ELECTRODOS DE Pb EN SOLUCIONES ACUOSAS DE HCl**

**María Eugenia Alassia, Manuel A. Pérez y Manuel López Teijelo**  
**INFIQC- Dpto. de Fisicoquímica, Fac. Cs. Químicas, Univ. Nacional de Córdoba**  
**Pabellón Argentina, Ala derecha, 2do. piso, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba**  
**E-mail: mperez@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

La formación de películas de óxidos y/o sales durante la polarización anódica de metales activos es un fenómeno relevante en procesos electroquímicos como maquinado electroquímico, pulido electrolítico, corrosión y baterías, encontrándose en la bibliografía numerosos trabajos sobre la composición y comportamiento electroquímico de películas anódicas formadas sobre electrodos de plomo en soluciones de ácido sulfúrico.

En este trabajo se estudia la cinética y mecanismo de la formación de películas anódicas sobre electrodos de Pb en soluciones acuosas de HCl. La transición activo-pasiva toma lugar inicialmente por un mecanismo de disolución/precipitación. La disolución activa del metal produce un incremento de la concentración de  $Pb^{2+}$  en la región interfacial y la formación de una película pasivante de  $PbCl_2$  ocurre por precipitación química cuando la concentración de iones plomo alcanza un valor crítico de supersaturación. Los estadios iniciales de crecimiento de la película salina también involucran un fenómeno de nucleación. El crecimiento de la película salina está controlado por un proceso óhmico de resistencia del electrolito en los poros y las características de zona pasiva están determinadas por la conductividad y porosidad de la película. A potenciales mayores, se produce el crecimiento de una película de óxido y se obtiene un cambio marcado de la cinética de crecimiento de la película.

D48  
ORAL

**CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA Y ELIPSOMÉTRICA DEL CRECIMIENTO Y ESTABILIDAD DE PELÍCULAS ANÓDICAS DE  $Sb_2O_3$  EN ELECTROLITOS ACUOSOS**

**Omar E. Linarez Pérez, Manuel A. Pérez y Manuel López Teijelo**  
**INFIQC, Depto. de Fisicoquímica, Fac. de Cs. Qcas., Univ. Nacional de Córdoba,**  
**Pab. Argentina, Ala 1, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba.**  
**E-mail: olinarez@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

En el presente trabajo se estudia el crecimiento anódico de películas de óxido de antimonio electroformadas bajo condiciones potenciodinámicas y/o galvanostáticas como así también su estabilidad en electrolitos acuosos. Se utilizan soluciones de diferente composición y pH para determinar las condiciones de pasivación/corrosión y el efecto de los aniones sobre la respuesta electroquímica. Mediciones de elipsometría realizadas durante la electroformación y crecimiento de películas de óxido permiten determinar el espesor durante el proceso como así también conocer el campo eléctrico en el interior del óxido. El estudio electroquímico muestra que el comportamiento anódico puede caracterizarse en base al crecimiento de películas de  $Sb_2O_3$  y su disolución química en el electrolito de formación. La evidencia electroquímica obtenida indica que el comportamiento anódico es dependiente de la naturaleza de los aniones del electrolito de formación. Se realizaron mediciones de espectroscopia de impedancia electroquímica de películas anódicas de óxido de diferente espesor para estudiar su comportamiento dieléctrico.

**D49**  
**ORAL**

**CORROSION DE ACEROS DE ARMADURA**

**L. M. Gassa<sup>(1)</sup> y M. R. Barbosa<sup>(2)</sup>**

<sup>(1)</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)- Universidad Nacional de La Plata, Suc. 4, C.C. 16, (1900) La Plata, Argentina. <sup>(2)</sup>Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, C.C. 12, (7400) Olavarría. E-mail: [lgassa@inifta.unlp.edu.ar](mailto:lgassa@inifta.unlp.edu.ar)

En términos generales, se sabe que dos son las causas por las cuales el acero sufre procesos de corrosión en dichas estructuras, una de ellas es el descenso del pH producido por carbonatación que origina la disolución de la película pasiva formada sobre el acero en contacto con el medio alcalino del hormigón quedando el acero desprotegido y la otra es la presencia de ion cloruro que origina el picado del acero. Actualmente existe cierta tendencia, por parte de las empresas productoras de acero, de fabricar un acero que, siendo de bajo costo, esté mejor preparado para resistir el ataque por corrosión. Por otro lado, el análisis de muestras de aceros extraídas de estructuras que superan los 50 años en servicio no manifiestan un intenso ataque por corrosión. Esto replantea la alternativa de considerar cambios en los aceros de manera de prolongar la vida útil de las estructuras. En este trabajo se analiza el comportamiento frente a la corrosión de aceros de armaduras estándar, utilizados en distintas condiciones y tiempos de servicio, y aceros de nueva formulación. El estudio se realiza empleando una solución simuladora del electrolito contenido en los poros del hormigón en la cual se burbujea CO<sub>2</sub> durante diferentes tiempos a fin de simular en laboratorio el proceso de carbonatación. Mediante la aplicación de técnicas electroquímicas potencioestáticas y potenciodinámicas se determinaron velocidades y tipo de corrosión. Los resultados se comparan con los obtenidos empleando soluciones de CO<sub>3</sub><sup>=</sup>/CO<sub>3</sub>H<sup>-</sup> a distintos pH. El diferente comportamiento obtenido para aceros de uso actual y de antigua data se correlaciona con las observaciones efectuadas en estructuras en servicio que sufrieron el proceso de carbonatación.

**D50**  
**ORAL**

**ELECTROQUÍMICA Y FÍSICO-QUÍMICA DE POLÍMEROS DERIVADOS DE ANILINA**

**Diego L. Raffa<sup>1</sup>; Fernando Battaglini<sup>1</sup>; Tong Leung<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>INQUIMAE, DOIAQF FCEN-UBA; Cdad. Universitaria, Pab.2 -1428 - Buenos Aires, Argentina. <sup>2</sup>Department of Chemistry, University Of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.  
**email: [battagli@qi.fcen.uba.ar](mailto:battagli@qi.fcen.uba.ar)**

Se realizaron trabajos de caracterización y derivatización de polímeros derivados de anilina continuando con la búsqueda de mejores propiedades para su utilización en sensores químicos. Se tomaron dos líneas de trabajo y se desarrollaron con la ayuda de técnicas electroquímicas y de análisis de superficies.

Por un lado, se modificó polianilina con propano sulfonato buscando la alquilación permanente de los nitrógenos como una estrategia para mejorar la conductividad a mayores pHs. Se observó que a pH 4,75 y 7,5 las conductividades mejoran con respecto a polianilina en iguales condiciones. Por otro lado se caracterizaron distintos copolímeros de anilina y aminobencilamina. Se estableció la estequiometría de dichos polímeros por XPS. Luego se modificaron con compuestos de Fe tales como ácido Ferroceno acético. Se verificó la presencia de Fe nuevamente por XPS.

**D 51 RETIRADO**

**D 52 RETIRADO**

**D53**

**RECUBRIMIENTOS VÍTREOS POR EL MÉTODO  
SOL - GEL  
PARA ACEROS INOXIDABLES**

**X. Gaviria\*, C. García\*, S. Ceré\*\***

**\*Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, Escuelas de Materiales y Física.  
A.A. 3840**

**\*\* INTEMA-Universidad Nacional de Mar del Plata, Argentina. Juan B. Justo  
4302. B7608FDQ. Mar del Plata. Argentina**

Dadas las ventajas económicas que presenta el acero inoxidable frente a otros materiales metálicos en múltiples aplicaciones dentro de las cuales se cuenta la fabricación de implantes ortopédicos, es importante buscar una alternativa que permita mejorar sus características en cuanto a resistencia a la corrosión. Una de estas alternativas es el desarrollo de recubrimientos que sirvan como barrera protectora de este material cuando éste se somete a la acción de agentes agresivos. En este trabajo se muestra la fabricación de dos recubrimientos silíceos obtenidos a partir del proceso sol-gel aplicados a aceros inoxidables. Con estos recubrimientos se pretende mejorar la resistencia a la corrosión de dichos sustratos, buscando que éstos sean más competitivos en diversas aplicaciones dentro de las que se destacan las biomédicas. Para la selección de los sustratos empleados se presentan las características principales de los aceros inoxidables. A partir de éstas se determina el tipo y los grados de los aceros que pueden ser compatibles con las condiciones que requiere el proceso sol-gel. Finalmente se presentan los procedimientos experimentales utilizados y los resultados obtenidos, que permiten concluir sobre el verdadero efecto de los recubrimientos aplicados.

**D 54 RETIRADO**

**D55**

**ESTUDIOS ESPECTROELECTROQUIMICOS SOBRE LA RELAJACIÓN DE PELICULAS DE POLÍMEROS DERIVADOS DE ARILAMINAS SUSTITUIDAS EN EL ANILLO DEPOSITADAS SOBRE ELECTRODOS**

**L.G. Gagliardi, M.J. Rodríguez Presa, M. I. Florit, D. Posadas\***  
**INIFTA, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas.**  
**Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.**  
**Suc. 4, C.C. 16, (1900), la Plata, Argentina.**  
**\*E-MAIL: dposadas@inifta.unlp.edu.ar**

Se estudió la respuesta espectral de películas de polímeros derivados de arilaminas sustituidas en el anillo, durante la relajación, a temperatura ambiente, en el intervalo de 200 a 1000 nm, en función del tiempo de espera a un valor cercano al potencial de reducción del polímero.

Las películas fueron preparadas por polimerización electroquímica; los experimentos espectroelectroquímicos se llevaron a cabo en soluciones de HClO<sub>4</sub> 3.7 M, HClO<sub>4</sub> 1 M, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 3.7 M, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1 M, y HCl 1 M. Los espectros UV-V fueron tomados con el polímero en estado estacionario y a diferentes intervalos de tiempo, mientras la película polimérica relaja, potenciostaticando el electrodo a un valor de potencial de -0.1 V vs ECS.

Se observan tres bandas de absorción a alrededor de 220, 258 y 267 nm. La primera de ellas se desplaza hacia el rojo, las otras dos permanecen invariables durante la relajación.

Las tres bandas aumentan en intensidad durante la relajación.

Los experimentos espectrofotoelectroquímicos muestran que durante el proceso de relajación, ocurren cambios conformacionales en la matriz del polímero.

**D56**

**COMPORTAMIENTO ELECTROQUIMICO DEL ESTAÑO PASIVADO EN SOLUCIONES ALCALINAS**

**Patricia E. ALVAREZ<sup>1</sup>, M. Eugenia FOLQUER<sup>2</sup> y Claudio A. GERVA<sup>3</sup>**  
<sup>1</sup>**Instituto de Física,** <sup>2</sup>**Instituto de Química-Física. Facultad de Bioquímica, Química**  
<sup>3</sup>**Farmacia. UNT. Ayacucho 491. (4000) Tucumán.**  
<sup>3</sup>**INIFTA. Facultad de Ciencias Exactas. UNLP. Suc. 4, C.C. 16. (1900) La Plata**  
**E-mail: palvare@unt.edu.ar**

La película pasiva de óxidos sobre estaño en contacto con soluciones buffer carbonato-bicarbonato, posee una estructura doble que comprende una capa interna de SnO<sub>2</sub> y una externa de SnO<sub>x</sub>OH<sub>(2-x)</sub> con (1 ≤ x ≤ 2). Curvas de polarización estacionarias medidas en 0.75 M KHCO<sub>3</sub> + 0.05 M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> muestran que en el rango de potencial -0.1 V/ 1.2 V (referidos a calomel saturado), se forma una película altamente pasivante sobre la superficie del sustrato de estaño. Para caracterizar la película anódica y determinar la influencia del potencial de formación del óxido, E<sub>f</sub>, en las propiedades de la misma, se realizaron experimentos de EIS a distintos potenciales dentro del alcance de la pasividad. Un modelo basado en el Point Defect Model (PDM) fue desarrollado a partir de las medidas de impedancia y curvas de polarización. En el sistema metal/óxido/solución, la corriente total I surge de la suma de I<sub>e</sub>, la corriente electrónica debida al transporte de electrones y/o huecos, y de I<sub>i</sub>, la corriente iónica debida al transporte de iones o vacancias a través de la película. El transporte iónico en el óxido es descrito en términos de la ecuación de transporte de alto campo derivada por Fromhold y Cook utilizando distintas condiciones de contorno en la interfase óxido/solución. Se obtuvo un valor D = (1.3 ± 0.1) × 10<sup>-11</sup> cm<sup>2</sup>s<sup>-1</sup> correspondiente a la difusividad de las vacancias del ión oxígeno; y un espesor de película L = 105 × 10<sup>8</sup> cm, a E<sub>f</sub> = 0.4 V. Para E<sub>f</sub> = 0 V la película es muy delgada y muestra el comportamiento de un aislante mientras que para valores mayores de E<sub>f</sub> se comporta como un semiconductor tipo n.

D57

**ESTUDIO ELECTROQUIMICO DE LAS PRIMERAS CAPAS DE OXIDO FORMADAS SOBRE COBRE EN SOLUCIONES DE CARBONATO-BICARBONATO**

**S.B. Ribotta<sup>1</sup>, C.F. Arrighi<sup>1</sup>, L.F. La Morgia<sup>1</sup>, L.M. Gassa<sup>2</sup>, M.E. Folquer<sup>1</sup>.**

**<sup>1</sup>Instituto de Química Física, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, UNT, Ayacucho 491. (4000) San Miguel de Tucumán.**

**<sup>2</sup>INIFTA, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Suc. 4, C.C. 16. (1900) La Plata.**

**E-mail: folquer@unt.edu.ar**

En este trabajo se profundizó en el conocimiento de los procesos de electroformación y electro-reducción de las primeras capas de óxido formadas sobre electrodos de cobre en soluciones buffer carbonato-bicarbonato, abarcando un intervalo amplio de pH y de fuerza iónica del electrolito.

Para ello se empleó la técnica de voltamperometría cíclica y sus variantes, complementada con microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

Del análisis de las medidas voltamperométricas se puede inferir que la formación y la reducción de Cu<sub>2</sub>O involucran especies de diferente reactividad, alcanzando algunas mayor estabilidad, de acuerdo al valor de potencial de conmutación anódico prefijado. Este hecho se sustenta con medidas de evolución de potencial a circuito abierto, desde el potencial de conmutación catódico.

Por otra parte, las observaciones efectuadas con SEM muestran las características superficiales de la película formada, que varían de acuerdo al intervalo de potencial analizado.

Con el empleo de EIS se confirmaron resultados obtenidos por voltamperometría cíclica y SEM. Los resultados óptimos de los ajustes realizados utilizando la función de transferencia adecuada, sugieren la formación de una primera capa porosa asociada a la electroformación de óxido cuproso.

D58

**ESTUDIO DINAMICO DEL SISTEMA Ni(OH)<sub>2</sub>/ NiOOH EN PRESENCIA DE CATIONES FORÁNEOS**

**Marta E. UÑATES<sup>1</sup>, María E. FOLQUER<sup>1</sup> y Silvia G. REAL<sup>2</sup>**

**<sup>1</sup>Instituto de Química-Física, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, U.N.T., Ayacucho 491, (4000) Tucumán.**

**<sup>2</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Facultad de Ciencias Exactas, U. N. L. P., Suc. 4, C.C. 16. (1900) La Plata.**

**E-mail: folquer@unt.edu.ar**

En este trabajo se realiza el estudio dinámico del comportamiento electroquímico en soluciones alcalinas, de electrodos coloidales de hidróxido de níquel coprecipitado con hidróxidos de cinc o cobalto, empleando la técnica de espectroscopía de impedancia electroquímica, a 25°C. Las medidas de impedancia se efectuaron en películas electro-oxidadas potencioestática y potenciodinámicamente.

Los espectros de impedancia experimentales fueron analizados usando una rutina de ajuste no lineal de acuerdo a diferentes funciones de transferencia según la región de potencial estudiada.

Los datos obtenidos de los resultados óptimos de los ajustes, reflejan cambios en las características de la película coloidal, tales como el grado de hidratación y de heterogeneidad de la misma. Asimismo, la conductividad del material activo se modifica, facilitando la reacción de transferencia de carga, sugiriendo cambios estructurales y la interconversión de las especies correspondientes a la cupla Ni(OH)<sub>2</sub>/ NiOOH.

**D59**  
**ORAL**

**ESTUDIO COMPARATIVO DE MONOCAPAS DE OCTANOTIOL Y OCTANODITIOL SOBRE Au (111)**

**M. L. CAROT, M. J. ESPLANDIU, E. M. PATRITO y V. A. MACAGNO**

**INFIQC. Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. (5000) Córdoba.**  
**E-mail: lcarot@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

Se investigó la desorción reductiva de monocapas de 1-octanotiol y de 1,8-octanoditiol sobre Au(111) mediante las técnicas de Voltametría Cíclica (CV), Espectroscopia de Impedancia Electroquímica (EIS) y Microscopía de Efecto Túnel (STM) en medios ácidos y básicos.

Con las medidas CV se caracterizó el empaquetamiento de las monocapas y la densidad de tiolatos en la superficie. Se monitorearon también los procesos de desorción reductiva y de readsorción oxidativa. La carga correspondiente al proceso de reducción de las monocapas de tiol y de ditiol indica que las monocapas se encuentran en su máxima densidad de empaquetamiento. En el proceso de readsorción oxidativa del tiol, el área y la forma de los picos dependen del pH y de la naturaleza del tiol.

Mediante las medidas de STM se pudo tener acceso al tipo de organización, estructura molecular y estabilidad de las películas autoensambladas en función del pH y del potencial del electrodo. Además ha sido posible monitorear en tiempo real y espacial los procesos de desorción oxidativa y reductiva.

**D60**

**CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA Y ESTRUCTURAL DE MONOCAPAS AUTOENSAMBLADAS DE ÁCIDOS MERCAPTOALCANOICOS SOBRE Au (111)**

**M. L. CAROT, E. MORÁN, V. A. MACAGNO y E. M. PATRITO**

**INFIQC. Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. (5000) Córdoba.**  
**E-mail: lcarot@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

Durante las últimas décadas, la adsorción de alcanotioles sobre sustratos metálicos (Au, Ag, etc.) ha provocado un gran interés en el intento de controlar numerosos fenómenos interfaciales. La funcionalización de alcanotioles con la finalidad de inmovilizar biomoléculas es en la actualidad un área de activa investigación en el diseño molecular. En tal sentido, aprovechando interacciones específicas que pueden desarrollar los grupos funcionales terminales de la monocapa autoensamblada con las biomoléculas se puede lograr la construcción de sensores inmunológicos y biosensores enzimáticos o el estudio de las reacciones de transferencia de carga.

El primer paso en el estudio de estos sistemas es la caracterización del sustrato base (monocristal+monocapa de tioles). En este trabajo se presenta un estudio de las propiedades electroquímicas y estructurales de monocapas simples y mixtas de ácido 3-mercaptopropanoico (MPA) y ácido 11-mercaptoundecanoico (MUA) adsorbidos sobre Au (111) mediante las técnicas de Voltametría Cíclica (CV), Espectroscopia de Impedancia Electroquímica (EIS) y Microscopía de Efecto Túnel (STM). El electrolito soporte utilizado fue buffer fosfato 25 mM, pH 7.2, debido que es el medio en el cual una gran cantidad de biomoléculas mantienen su forma nativa y su actividad.

D62

**DESARROLLO DE UNA CELDA DE ELECTROSINTESIS ORGANICA**

**M. Vago, E.J. Calvo**

**INQUIMAE, DQIAyQF, FCEN – Universidad de Buenos Aires. C. Universitaria. Pabellón II. AR-1428 Buenos Aires. Argentina . Email: [jmvmaxum@hotmail.com](mailto:jmvmaxum@hotmail.com)**

**J. Macareno, J. Naveira**

**Departamento de Investigación y Desarrollo  
Laboratorios Temis Lostaló  
Cepita 3178. AR-1285 Buenos Aires**

Se desarrolló una celda filtro-prensa de laboratorio consistente en cátodos de carbono vitreo y filtros de carbono con partículas de Pd depositadas, colector de corriente de acero inoxidable, membrana de Nafion® 117 de 180 micrómetros de espesor, ánodos de Ti platinizados construida totalmente en Teflon con entradas y salidas independientes en los respectivos compartimientos anódico y catódico. Los líquidos son impulsados mediante una bomba peristáltica. Se utilizó como reacción modelo la reducción catalítica de L-cistina a L-cisteína, determinando las concentraciones analíticas espectrofotométricamente previa separación por HPLC. Mediante microelectrodos se determinó el potencial en función de la distancia.

Se estudiaron los parámetros de la celda: relación área-volumen de cátodos de diferente espesor, velocidad de flujo lineal y constante de transferencia de masa, concentración de reactivos, potencial de electrodo, densidad de corriente, carga de paladio, etc. Se emplean en el análisis modelos de ingeniería electroquímica convencionales (Pletcher y Walsh).

D63

**MICROSCOPIA ELECTROQUÍMICA DE BARRIDO (SECM) DE PELÍCULAS ENZIMATICAS AUTOENSAMBLADAS**

**C. González-Inchauspe, E. Forzani, P. Perna, E.J. Calvo**

**INQUIMAE, DQIAQF, FCEN – Universidad de Buenos Aires. C. Universitaria. Pabellón II. AR-1428 Buenos Aires. Argentina . Email: [carlota@qi.fcen.uba.ar](mailto:carlota@qi.fcen.uba.ar)**

Se informa sobre estudios con un microscopio electroquímico de barrido (SECM) construido en el laboratorio con control óptico de altura. Se estudiaron superficies modificadas con enzimas redox como glucosa oxidasa depositada capa-por-capa electrostáticamente y "cableada por polímero redox". Se utilizó el SECM en modo amperométrico y altura constante con ferroceno metanol como reactivo redox que se oxida en micro-electrodos de 10 a 25 micrómetros de diámetro y el ferriceno, producto oxidado, reacciona como mediador redox oxidando el FADH<sub>2</sub> de la enzima en presencia de exceso de glucosa en solución, amplificando la corriente del SECM. De este modo el SECM "mapea" zonas enzimáticas y zonas no enzimáticas construyendo una imagen química de la superficie.

Alternativamente se estudia la detección de peróxido de hidrógeno en el microelectrodo, producido por oxidación aeróbica de glucosa catalizada por glucosa oxidasa, GOx, depositada. Para ello se modificaron micro-electrodos con peroxidasa de soja cableada por el mismo polímero redox de poli-alilamina derivatizada con un complejo de osmio. Estos estudios permitieron el estudio de la competencia entre la oxidación aeróbica de la glucosa y la mediación redox medida esta última por la corriente catalítica en el sustrato con la enzima autoensamblada. Los patrones superficiales de enzima se "escribieron" mediante el SECM por desorción controlada local de mercapto-decano autoensamblado sobre oro, utilizando las zonas donde se removió el tiol para autoensamblar electrostáticamente glucosa oxidasa y el polímero redox mediador, PAH-Os.

**D64**

**ESTUDIO ESPECTROSCOPICO IN SITU DE TIOUREA(TU)  
ADSORBIDA SOBRE ELECTRODOS DE PLATINO**

**José L. Rodríguez<sup>1</sup>, Elena Pastor<sup>1</sup>, Gonzalo García<sup>2</sup> y Gabriela I. Lacconi<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Dpto. Química Física, Universidad de La Laguna, La Laguna-Tenerife 38071-España  
<sup>2</sup>INFIQC, Dpto. Físicoquímica, Fac. Cs. Químicas, Universidad Nacional de Córdoba  
(5000) Córdoba -Argentina., E-mail: [glacconi@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:glacconi@fisquim.fcq.unc.edu.ar)

Tiourea es un aditivo común empleado en la electrodeposición de metales debido a que modifica las propiedades de los depósitos. La información relativa a la interacción TU-superficie es fundamental para obtener una aproximación del mecanismo de acción de estos compuestos.

En esta comunicación se ha utilizado espectroscopía FTIR in-situ para estudiar la adsorción de TU en HClO<sub>4</sub> sobre platino y espectrometría DEMS para la detección de productos gaseosos generados durante la oxidación de TU.

La combinación de experimentos electroquímicos convencionales con espectroscopia vibracional in-situ y DEMS proveen una óptima conexión entre los niveles microscópico o molecular de los procesos superficiales y la respuesta electroquímica del sistema.

Los resultados muestran que la adsorción de TU en solución ácida depende del potencial aplicado y la concentración de TU. Se evidencia, además, que la adsorción de TU está acompañada con la coadsorción de aniones. A través del uso de una celda de flujo para ambas mediciones, FTIR y DEMS, las especies adsorbidas fueron aisladas a diferentes potenciales y sus procesos de oxidación fueron comparados con los obtenidos desde el seno de la solución.

**D65  
ORAL**

**ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO DE LA  
ELECTRO-OXIDACION DE TIOUREA SOBRE  
ELECTRODOS DE ORO EN SOLUCIONES ACIDAS  
UTILIZANDO FTIRRAS**

**A. E. Bolzán, T. Iwasita y A. J. Arvia**

**Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)  
(UNLP, CONICET), Argentina**

**Sucursal 4, Casilla de Correo 16,(1900) La Plata**

**Instituto de Química de San Carlos, Universidad de San Pablo, San Carlos, Brasil**

**E-mail: [aebolzan@inifta.unlp.edu.ar](mailto:aebolzan@inifta.unlp.edu.ar)**

Se estudió la electro-oxidación de tiourea sobre electrodos de oro policristalino en soluciones acuosas ácidas mediante medidas in situ utilizando FTIRRAS y voltamperometría cíclica. La aparición de especies en solución relacionadas con la formación de especies complejas de Au(I)-tiourea y productos propios de la electro-oxidación de tiourea es monitoreada siguiendo los cambios en los espectros IR con el potencial aplicado al electrodo de oro. Los datos experimentales muestran la formación del complejo soluble  $[Au(CS(NH_2)_2)_2]_2SO_4$  durante la electrodisolución de oro. Este proceso comienza a ca. 0.15 V (vs ENH), concomitantemente con los primeros estadios de la electro-oxidación de tiourea, la cual produce disulfuro de formamidina a potenciales inferiores a 1.2 V (vs ENH). La formación del complejo de oro y la de sulfuro de formamidina son procesos cuasi-reversibles de acuerdo a los espectros de FTIRRAS. Cuando se alcanza la región de potenciales relacionados con la formación de películas anódicas conteniendo oxígeno, la electro-oxidación de tiourea lleva a la formación de dióxido de carbono, iones sulfato y cianocompuestos. Se detecta además la formación de sulfato adsorbido sobre la superficie de oro cuando el potencial alcanza un valor superior a los 1.2 V, exhibiendo el adsorbato un desplazamiento de banda de  $27\text{ cm}^{-1}\text{ V}^{-1}$ .

**D66  
ORAL**

**COMPORTAMIENTO VOLTAMPEROMÉTRICO Y ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO POR FTIR DE LOS PRODUCTOS DE ELECTRO-OXIDACIÓN DE TIOUREA Y TIOUREAS SUSTITUÍDAS SOBRE ELECTRODOS DE PLATINO EN MEDIO ACIDO**

**A. E. Bolzán, P. L. Schilardi, A. Cuesta, R. C. V. Piatti y A. J. Arvia**

**Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)**

**(UNLP, CONICET), Argentina**

**Sucursal 4, Casilla de Correo 16,(1900) La Plata**

**Instituto de Química Física "Rocasolano", Madrid, España**

**E-mail: [aebolzan@inifta.unlp.edu.ar](mailto:aebolzan@inifta.unlp.edu.ar)**

Se presenta un estudio comparativo sobre el comportamiento voltamperométrico y los correspondientes espectros infrarrojos in situ, de tiourea, metil-tiourea, 1,3 dimetil-tiourea y tetrametil-tiourea sobre electrodos de platino en soluciones acuosas de ácido sulfúrico 0.5 M en la región de potencial entre 0.05 V y 1.6 V (vs. EHN). La electro-oxidación de las tioureas comienza a ca. 0.65 V (vs ENH) y presenta dos regiones de electro-oxidación bien definidas. En los primeros estadios de electro-oxidación, entre 0.45 y 0.9 V, la desprotonación de las tioureas parcialmente sustituidas genera productos solubles cuya respuesta electroquímica corresponde con la formación de disulfuro de formamidina. A potenciales superiores a 0.9 V, la electro-oxidación de tioureas se puede describir como un proceso complejo en el cual intermediarios adsorbidos y productos solubles compiten con la formación de la película de óxido sobre platino. Las reacciones electroquímicas obedecen a una cinética intermedia fuertemente influenciada por la presencia de residuos anódicos. Dependiendo del tipo de tiourea considerado, los espectros de FTIR muestran la formación de productos de oxidación en solución tales como dióxido de carbono, iones sulfato y compuestos orgánicos conteniendo grupos ciano o carbonilo.

**D67**

**PREPARACIÓN DE MnO<sub>2</sub> A PARTIR DE LIXIVIADOS DE PILAS ALCALINAS AGOTADAS**

**C.A. Andrade Tacca y M. M. E. Duarte**

**Instituto de Ingeniería Electroquímica y Corrosión, Universidad Nacional del Sur, Avda. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina. E-mail: [mduarte@criba.edu.ar](mailto:mduarte@criba.edu.ar)**

En este trabajo se describen la obtención de MnO<sub>2</sub> por electrooxidación de lixiviados en ácido sulfúrico de pilas alcalinas agotadas.

Se desmantelaron pilas alcalinas tamaño D, separándose el blindaje, los contactos y el separador. El polvo oscuro resultante se secó, se tamizó y se caracterizó por difracción de rayos X para establecer su composición. Se determinaron las condiciones óptimas de extracción de cinc y manganeso con ácido sulfúrico, analizándose las soluciones resultantes por ICP.

En la pasta inicial se determinó la presencia de ZnO, Mn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, KFeO<sub>2</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, carbón y KO<sub>2</sub>. En las soluciones de lixiviado se detectó Zn y Mn como principales componentes, bajas concentraciones de Fe y Cu, y trazas de Hg, Cd, Pb y Ni. La concentración de cinc varió entre 0.17 y 0.73 moles L<sup>-1</sup> y la de manganeso entre 0.03 y 0.74 moles L<sup>-1</sup>.

Se estudió el comportamiento de un electrodo de carbono vítreo en las distintas soluciones, por voltametría cíclica, en el rango de potenciales 0 - 1.4 V (ECS). En el barrido anódico se observó una pequeña onda correspondiente a la oxidación de Fe<sup>2+</sup> a Fe<sup>3+</sup>, y un pico pronunciado a 1.2 V, que corresponde a la oxidación de Mn<sup>2+</sup> a MnO<sub>2</sub>. En el barrido anódico se observaron varios picos de reducción del óxido de manganeso, y una pequeña onda debida a la reducción de Fe<sup>3+</sup>.

Se preparó MnO<sub>2</sub> electrolítico bajo condiciones potencioestáticas utilizando un ánodo de tela o fieltro de fibra de carbono; el material resultante se caracterizó por microscopía electrónica de barrido, EDAX y difracción de rayos X, hallándose que estaba compuesto por MnO<sub>2</sub> y MnOOH. No se detectó la presencia de impurezas provenientes del lixiviado.

D68

### DESARROLLO DE SENSORES ELECTROQUÍMICOS PARA EL DOSAJE DE ANTIOXIDANTES FENOLICOS EN MATRICES ALIMENTARIAS

**S. ALARCÓN,<sup>1</sup> D. CAMPAGNONE,<sup>2</sup> M. DEL CARLO<sup>2</sup> y G. PALLESCHI.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Dto. Química Analítica, FCByF, UNR. Suipacha 531. Rosario (2000). Argentina.

E-mail: [salarcon@fbioyf.unr.edu.ar](mailto:salarcon@fbioyf.unr.edu.ar)

<sup>2</sup> Dto. di Scienze degli Alimenti, Università degli Studio di Teramo, 64023 Mosciano S. Angelo, Teramo, Italia. [campagnone@unite.it](mailto:campagnone@unite.it)

<sup>3</sup> Dto. Di Scienze e Tecnologie Chimiche, Il università di Roma, Tor Vergata, Viale della Rierca Scientifica, 00133 Roma, Italia. [palleschi@stc.uniroma2.it](mailto:palleschi@stc.uniroma2.it)

La evaluación cuantitativa de antioxidantes es un importante tópico en la química de alimentos donde existe un creciente interes en el desarrollo de métodos de análisis rápidos, sencillos y sensibles.

En el presente trabajo se presenta el desarrollo de dos sensores electroquímicos para la evaluación de derivados fenólicos en aceites de oliva y vinos:

*Sensor de pasta de carbono con tirosinasa (Tyr-CP).* La tirosinasa es una fenol-oxigenasa que catalisa la oxidación de grupos fenólicos. La detección amperométrica del producto enzimático es usado como estrategia del biosensor para la determinación de residuos fenólicos en solución.

*Screen Printed Carbon Electrode (SPE).* A partir de mediciones de voltametría diferencial de pulso se determinaron los contenidos de biofenoles en muestras de vinos.

Los resultados obtenidos fueron contrastados con los del procedimiento colorimétrico de referencia.

D69

### DESARROLLO DE UN SENSOR ELECTROQUÍMICO PARA LA DETECCIÓN DE ANTICUERPOS ANTI-TRIPANOSOMA *cruzi*.

**Lagier C.M.,<sup>1</sup> Alarcón S.H.,<sup>1</sup> Pagani D.,<sup>1</sup> Marcipar I.<sup>2</sup> y Marcipar A.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Dto. Química Analítica, FCByF, UNR. Suipacha 531. Rosario (2000). Argentina.  
[clagier@fbioyf.unr.edu.ar](mailto:clagier@fbioyf.unr.edu.ar)

<sup>2</sup> INTEBIO, Fac. Bioquímica y Cs. Biológicas. UNL. Paraje El Pozo. Santa Fe (3000).

Se diseñó un inmunoensayo enzimático con detección electroquímica para verificar la presencia de anticuerpos anti-Tripanosoma *cruzi*. El sensor se construyó a partir de electrodos de oro modificados con tiol sobre el que se unieron antígenos de Tripanosoma *cruzi*, obtenidos a partir de un homogenado del parásito. Los sitios no modificados del electrodo se bloquearon con caseína bovina y posteriormente, se expuso el electrodo a diluciones de suero Chagas positivo. La construcción del autoensamblado se concluyó, sumergiendo el electrodo en una dilución de anti-inmunoglobulina humana conjugada con una enzima redox que se liga al anticuerpo anti-Tripanosoma *cruzi*. La evaluación de la constitución del autoensamblado se realizó agregando el sustrato de la enzima sobre una solución de buffer conteniendo electrolito soporte, ante la presencia de un mediador soluble. Manteniendo un potencial catódico sobre el electrodo, se consiguió registrar una corriente catalítica indicativa de la reducción electroquímica del mediador que, actuando como co-sustrato, fue oxidado por reacción con la enzima conjugada.

Se evaluó el comportamiento del inmunosensor frente a distintas diluciones de suero Chagas positivo y frente a diluciones de sueros no reactivos.

**D70  
ORAL**

**COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE LA  
TIOUREA SOBRE ELECTRODOS DE ORO EN  
SOLUCIONES ACIDAS**

**A. E. Bolzán, L. M. Gassa, R. C. V. Piatti y A. J. Arvia**

**Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) (UNLP,  
CONICET), Argentina. Sucursal 4, Casilla de Correo 16,(1900) La Plata**

**E-mail: [aebolzan@inifta.unlp.edu.ar](mailto:aebolzan@inifta.unlp.edu.ar)**

Se estudia el comportamiento electroquímico de la tiourea sobre electrodos de oro en soluciones ácidas en la región de potencial entre -0.2 y 1.7 V (vs ENH) mediante voltamperometría convencional y modulada, medidas de potencial de reposo, de electrodo rotante de disco y de disco y anillo. El valor del potencial de reposo está aparentemente controlado por una reacción electroquímica que involucra a las especies disulfuro de formamidina, tiourea adsorbida y el complejo soluble  $[Au(TU)_2]^+$ . Para concentraciones de tiourea entre 1 y 50 mM, el potencial de reposo decrece linealmente con el logaritmo de la concentración de tiourea, con una pendiente de ca. -0.090 V decada<sup>-1</sup>, en tanto que para concentraciones de tiourea entre 0.1 y 0.25 mM, la pendiente se aproxima a -0.120 V decada<sup>-1</sup>. La voltamperometría convencional y triangularmente modulada indican la adsorción cuasi-reversible de la tiourea en la región de potencial entre -0.2 y 0.1 V, y la electro-oxidación posterior a disulfuro de formamidina entre 0.2 y 0.9 V. Esto último ocurre simultáneamente con el proceso de electrodisolución de oro, el cual produce especies complejas solubles  $[Au(TU)_2]^+$ , y prevalece a bajas velocidades de barrido de potencial. Dependiendo del potencial y del tiempo de adsorción, diferentes adsorbatos derivados de la tiourea se forman sobre la superficie de oro. La electro-oxidación de estos adsorbatos tiene lugar entre los 0.9 y 1.7 V, dando como resultado la formación de iones sulfato, dióxido de carbono y cianocompuestos. Los distintos procesos involucrados se caracterizan mediante el empleo de espectroscopia de impedancia electroquímica determinándose los parámetros cinéticos correspondientes.

**D71**

**BIOSENSOR DE GLUCOSA BASADO EN LA  
INMOVILIZACIÓN DE GLUCOSA OXIDASA SOBRE  
ELECTRODOS DE CARBONO RODINIZADOS**

**Silvia A. MISCORIA<sup>1</sup>, Gustavo D. BARRERA<sup>1</sup>, Gustavo A. RIVAS<sup>2</sup>**

**<sup>1</sup>Dpto de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de la  
Patagonia "San Juan Bosco". Km 4, 9000 Comodoro Rivadavia.**

**<sup>2</sup>INFIQC. Departamento de Físico Química, Facultad de Ciencias Químicas,  
Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba.**

**E-mail: [grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar)**

Se presenta un biosensor enzimático para la determinación amperométrica de glucosa basado en la inmovilización de glucosa oxidasa (GOx) sobre electrodos de carbono vítreo y películas gruesas de carbono previamente rodinizados y cubiertos por una película de politiramina.

Se estudió la influencia de la concentración de GOx y de rodio, así como de los tiempos y potenciales de deposición de ambos en la performance del bioelectrodo resultante. En todos los casos, la señal analítica se obtuvo amperométricamente a partir de la oxidación del peróxido de hidrógeno enzimáticamente generado, la cual es eficientemente catalizada por el rodio presente en la capa de bio-reconocimiento. El uso de politiramina electrogenerada "in situ" permitió obtener una respuesta a glucosa altamente selectiva, sin interferencia de AA y AU aún en niveles por encima de los máximos fisiológicos. De este modo, el acoplamiento de las propiedades catalíticas del rodio hacia el peróxido de hidrógeno y las propiedades permselectivas de la politiramina, permiten obtener biosensores altamente sensibles y selectivos y abre las puertas al desarrollo de nuevos biosensores que tengan como elemento de reconocimiento otras enzimas productoras de peróxido de hidrógeno.

D72

**BIOSENSOR ENZIMÁTICO PARA LA CUANTIFICACIÓN DE GLUCOSA PREPARADO POR AUTOENSAMBLADO DE POLIELECTROLITOS SOBRE SUPERFICIES DE ORO**

**M. C. RODRÍGUEZ y G. A. RIVAS**

**INFIQC. Departamento de Físico Química. Facultad de Ciencias Químicas.  
Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba.**

**E-mail: grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

En este trabajo se propone un nuevo biosensor enzimático para la determinación selectiva de glucosa basado en la deposición de polielectrolitos capa por capa sobre electrodos de oro.

La arquitectura supramolecular fue obtenida por deposición de polietilenimina (PEI) y glucosa oxidasa (GOx) a pH 7.40 sobre una superficie de oro modificada con el ácido 3-mercaptopropil-sulfónico. Las determinaciones se hicieron a partir de la oxidación del peróxido de hidrógeno enzimáticamente generado a un potencial de 0,700 V.

Se evaluó la influencia de variables conectadas con la deposición de los polielectrolitos en la respuesta del bioelectrodo hacia glucosa como así también hacia los interferentes habituales tales como ácido ascórbico, ácido úrico y acetaminofen. Se investigó el efecto de las concentraciones y del tiempo de deposición de los polielectrolitos, el número de bicapas y la incorporación de otros polielectrolitos tales como ADN de doble y simple cadena (ds y ssADN) y nafion en la performance analítica del bioelectrodo. El bioelectrodo resultante de la deposición de seis bicapas de PEI y GOx conteniendo ssADN y nafion permitió obtener una respuesta altamente selectiva hacia glucosa.

D73

**BIOSENSOR ENZIMÁTICO PARA FENOLES Y CATECOLES BASADO EN AUTOENSAMBLADOS DE QUITOSANO Y POLIFENOL OXIDASA. APLICACIONES ANALÍTICAS Y ESTUDIO CINÉTICO**

**M. C. Rodríguez<sup>1</sup>, J. Desbrieres<sup>2</sup>, I. Coche-Guérente<sup>2</sup>, P. Labbé<sup>2</sup> and  
G. A. Rivas<sup>1</sup>**

**<sup>1</sup>INFIQC. Departamento de Físico Química. Facultad de Ciencias Químicas.  
Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba.**

**E-MAIL: grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

**<sup>2</sup> Laboratoire d'Electrochimie Organique et de Photochimie Rédox, UMR 5630,  
Université Joseph Fourier-CNRS, BP 53, 38041 Grenoble, Cedex 9, Francia.**

En esta presentación se propone una nueva capa de bio-reconocimiento para la cuantificación de fenoles y catecoles basada en el autoensamblado de quitosano (CHI) cuaternario y polifenol oxidasa (PPO) sobre un electrodo de disco rotante de carbono vítreo. La arquitectura supramolecular consiste en una capa precursora sobre la que posteriormente se depositan PPO y CHI. Los resultados obtenidos empleando fenol y catecol como sustrato mostraron un excelente acuerdo con el modelo teórico. A través de dicho modelo se evaluaron las propiedades de la película, se caracterizó la difusión a través de la misma y se extrajeron los parámetros cinéticos del bioelectrodo resultante, en particular la permeabilidad y la actividad enzimática de la capa de bio-reconocimiento.

Se encontró que a pesar de la pequeña cantidad de enzima inmovilizada la sensibilidad alcanzó el valor de  $2500 \text{ A m}^{-1} \text{ cm}^{-1}$  demostrando que el entorno provisto por el CHI permite que una fracción muy importante de la enzima atrapada sea accesible a las moléculas de sustrato manteniendo, además, un alto nivel de actividad.

**D74 RETIRADO**

**D75**

**USO DE UN POLÍMERO MELÁNICO PARA MEJORAR LA  
SELECTIVIDAD DE BIOSENSORES DE GLUCOSA**

**María D. RUBIANES y Gustavo A. RIVAS**

**INFIQC. Departamento de Físico Química. Facultad de Ciencias Químicas.  
Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba.**

**E-mail: [grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar)**

Se presentan resultados acerca de la determinación altamente sensible y selectiva de glucosa empleando electrodos de pasta de grafito conteniendo micropartículas de platino y glucosa oxidasa (GOx), modificados con un polímero tipo melanina.

El polímero es electrogenerado mediante la aplicación de un potencial de 1,0 V durante 120 minutos a partir de una solución de L-dopa  $3,0 \times 10^{-3}$  M en "buffer" fosfato 0.050 M pH 7,40. Las determinaciones amperométricas se realizaron a 0.700 V y la señal analítica se obtuvo a partir de la oxidación del peróxido de hidrógeno generado. Se analizó la influencia de la cantidad de platino y GOx en la respuesta hacia glucosa e interferentes habituales en matrices biológicas.

La combinación de las propiedades permselectivas del polímero melánico, que bloquea el paso de aniones, y de las propiedades catalíticas del platino hacia el peróxido de hidrógeno, permite obtener un biosensor para glucosa con una excelente performance: rápida respuesta (alrededor de 10 segundos por muestra), amplio intervalo lineal (hasta  $3,0 \times 10^{-2}$  M), bajos límites de detección (60  $\mu$ M) y una muy buena estabilidad. Así la utilización del polímero melánico posibilita la determinación altamente selectiva de glucosa, con una interferencia del 1,0 % para ácido ascórbico y del 10% para ácido úrico para niveles aún mayores que los máximos fisiológicos.

D76 RETIRADO

D77  
ORAL

**VOLTAMETRÍA DE ONDA CUADRADA APLICADA AL  
ESTUDIO DEL MECANISMO DE ELECTROADSORCIÓN  
OXIDATIVA DE DERIVADOS DE LA QUINOLINA SOBRE  
Hg**

**Fernando S. GARAY y Velia M. SOLIS**

**INFIQC, Departamento de Físico Química, Facultad de Ciencias Químicas, UNC,  
Pabellón Argentina 2<sup>do</sup> piso - ala 1, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina.**

**E-MAIL: vsolis@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

Se presentan modelos teóricos que analizan la respuesta correspondiente a la reducción de complejos metálicos acumulados por adsorción mediante voltametría de onda cuadrada. Los modelos teóricos desarrollados consideran el efecto de trabajar con concentraciones de ligando que no se encuentren en gran exceso respecto a la concentración del complejo metálico. Se presentan respuestas voltamperométricas teóricas que contemplan casos en los que tanto el complejo como la especie metálica reducida y/o el ligando permanezcan adsorbidos y/o en solución. Se analizan las dependencias de los picos de corriente en función de la reversibilidad de la reacción redox y de la relación que existe entre las concentraciones del ligando en exceso y del complejo. Los modelos teóricos son utilizados para el estudio de la adsorción oxidativa de derivados de la quinolina sobre mercurio. Los ajustes entre las respuestas experimentales y teóricas permiten inferir que los complejos de mercurio presentan cambios en su mecanismo de electroreducción cuando se modifica el pH de la solución. También se determinan valores para la constante de transferencia de carga, el coeficiente de transferencia de carga y las constantes de adsorción para las especies electroactivas analizadas a distintos pH, la amplitud de la onda cuadrada y la frecuencia de barrido.

**D78**

**DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS:  
EFECTO DE LA VELOCIDAD DE BARRIDO**

V. Costanza<sup>(1)</sup>, M. R. Canto<sup>(1)</sup>, C. A. Marozzi<sup>(2)</sup> y A. C. Chialvo<sup>(2)</sup>

(1) Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC)  
UNL-CONICET, Güemes 3450, 3000 Santa Fe

(2) Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE)  
Facultad de Ingeniería Química (UNL), Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe  
E-mail: [achialvo@fiquis.unl.edu.ar](mailto:achialvo@fiquis.unl.edu.ar)

La evaluación de los parámetros cinéticos de la reacción de desprendimiento de hidrógeno (RDH) ha sido evaluada históricamente a partir de la dependencia experimental  $J=J(\eta)^{Estac.}$  en estado estacionario. Para ello se requiere realizar experiencias potenciostáticas, aunque usualmente esta determinación se realiza mediante la aplicación de un barrido de potencial lento. En estas condiciones, se considera que el efecto pseudocapacitivo no contribuye significativamente a la dependencia  $J=J(\eta)$ . Si bien esta argumentación es cualitativamente correcta, no se ha estudiado cuantitativamente cuál es el dominio de velocidades donde tal aproximación es válida. Este trabajo presenta resultados de la evaluación teórica de la dependencia  $J=J(\eta)^{Barrido}$  que surge de resolver la cinética de la RDH descrita mediante el mecanismo de Volmer-Heyrovsky-Tafel cuando el electrodo es perturbado mediante un barrido triangular de potencial. Los resultados obtenidos para diferentes conjuntos de parámetros cinéticos elementales muestran la existencia de una marcada histéresis en la dependencia del cubrimiento de hidrógeno adsorbido con el sobrepotencial, la cual solo se hace despreciable a muy bajas velocidades de barrido. Paralelamente, la dependencia  $J=J(\eta)$  observa una conducta similar que fue puesta en evidencia a través de la relación  $J(\eta)^{Barrido} / J(\eta)^{Estac.}$ .

**D79**

**ESTUDIO ELECTROQUIMICO DE *PSEUDOMONA* sp  
SOBRE LATON AL ALUMINIO.**

Frontini, María Alejandra, Rosso de Sánchez, Susana

División Corrosión, INTEMA, Facultad de Ingeniería, UNMdP.  
J.B. Justo 4302, Mar del Plata. CP B7608FDQ. E-mail: [frontini@mdp.edu.ar](mailto:frontini@mdp.edu.ar)

En las superficies metálicas el desarrollo de un biofilm genera graves problemas por la aceleración de procesos corrosivos. El control del desarrollo de la película biológica es importante porque su formación, entre otros efectos, provoca un ensuciamiento de la superficie donde se ha desarrollado, produciendo celdas de aireación diferencial y metabolitos agresivos.

Numerosos microorganismos que crecen en contacto con las superficies metálicas influyen sobre la formación de las películas superficiales, provocando la falta de adherencia o disolución de las mismas. Por ello se ha estudiado la influencia de las bacterias sobre las películas superficiales aplicando la técnica de voltametría cíclica y curvas de polarización, en agua de mar artificial en ausencia y presencia de bacterias. Las muestras fueron expuestas a diferentes tiempos de inmersión a potencial libre.

Se evaluó también la influencia de las bacterias sobre el potencial de picado (Epic) de los sistemas bajo estudio. Esto es, porque es sabido que Epic caracteriza la resistencia de los metales a sufrir corrosión por picado; es considerado una medida de susceptibilidad al picado en soluciones agresivas.

Está documentado que la mayoría de los materiales metálicos sufren picado en soluciones que contienen iones cloruros y otros halógenos. Los iones cloruros son el mayor constituyente del agua de mar. Las técnicas electroquímicas utilizadas fueron voltametrías cíclicas y curvas de polarización, y la misma metodología antes expuesta. La cepa bacteriana utilizada es salvaje obtenida de los tubos de los condensadores de una Central Termoeléctrica.

**D80**

**ESTUDIO COMPARATIVO DE LA RESPUESTA  
VOLTAMÉTRICA DE ONDA CUADRADA CORRESPON-  
DIENTE A COMPLEJOS DE COBRE CON DERIVADOS DE  
LA QUINOLINA ANALIZADOS A DIFERENTES pH**

**Fernando S. GARAY y Velia M. SOLIS**

**INFIQC, Departamento de Físico Química, Facultad de Ciencias Químicas, UNC,  
Pabellón Argentina 2<sup>do</sup> piso - ala 1, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina.**

**E-mail: vsolis@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

Se realiza un estudio comparativo del mecanismo de reacción de complejos de Cu(II) con derivados de la quinolina como la oxina (Ox), la sulfoxina (Sox) y el ferrón (Fer) mediante la simulación de sus perfiles experimentales de voltametría de onda cuadrada. El Cu(II) forma complejos muy estables con estos derivados de la quinolina, los que pueden acumularse mediante adsorción sobre electrodos de Hg. Los esquemas de reacción empleados para la simulación de los perfiles voltamétricos experimentales permiten establecer que durante la reducción del complejo adsorbido el metal reducido se amalgama en el mercurio y que se libera al ligando en la solución. En todos los casos se determina que prevalecen complejos adsorbidos con estequiometría 1:2. Se realiza un estudio comparativo entre las constantes efectivas de formación de los distintos complejos estudiados y el valor de la constante de transferencia de carga determinado para cada complejo. También se analizan las dependencias del pico de corriente diferencial en función de la frecuencia de barrido y del pH, relacionando los cambios observados con los valores de las constantes de transferencia de carga que se determinaron mediante la simulación de los voltamperogramas experimentales. Se estiman cambios locales de la concentración del ligando que se deberían a la desorción de estas especies durante el barrido de potencial.

**D 81 RETIRADO**

D82

**REACCION DE OXIDACION DE HIDROGENO:  
INTERPRETACION DE LOS DIAGRAMAS  
DE LEVICH-KOUTECKY**

**M.R. Gennero de Chialvo y A.C. Chialvo**

**Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE)**

**Facultad de Ingeniería Química (UNL)**

**Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe (Argentina)**

**E-mail: mchialvo@fiquis.unl.edu.ar**

La reacción de oxidación de hidrógeno (ROH) opera bajo control mixto alcanzando rápidamente a sobrepotenciales no muy elevados una corriente límite. Históricamente la misma ha sido asignada a la existencia de una corriente límite difusional, producto del agotamiento superficial del hidrógeno disuelto. Por otra parte, cuando la reacción de oxidación de hidrógeno involucra la etapa de Tafel, en ausencia de limitaciones por transferencia de materia, la velocidad de reacción alcanza una corriente límite cinética cuando el cubrimiento superficial por hidrógeno adsorbido se anula. En consecuencia, dependiendo de los parámetros cinéticos elementales que caractericen la ROH es posible que se alcance el límite cinético antes que el difusional.

En el presente trabajo se dedujeron las expresiones cinéticas rigurosas de la ROH descriptas mediante el mecanismo de Volmer-Heyrovsky-Tafel operando bajo control difusional del hidrógeno molecular. A partir de las mismas se analizan las condiciones cinéticas de la ROH, especialmente orientadas a la determinación de las condiciones en que prevalece una u otra forma de corriente límite y cómo esta afecta la obtención de parámetros cinéticos mediante el uso de los diagramas de Levich-Koutecky.

D83

**DESARROLLO DE MEMBRANAS FINAS PARA CELDAS  
DE COMBUSTIBLE DE ELECTROLITO POLIMERICO**

**C. A. Marozzi, L. Krishnan, A. B. Bocarsly, S. Srinivasan**

**Department of Chemistry, Frick Laboratory, Princeton University**

**Washington Road and William Street, Princeton, NJ 08544, USA**

**E-mail: cmarozzi@fiquis.unl.edu.ar**

Se ha realizado el estudio de las condiciones de preparación en el laboratorio de membranas finas de intercambio protónico a partir de soluciones comerciales de Nafion, para su uso en celdas de combustible con membrana de electrolito de polímero. Se investigó la influencia de distintas variables en la formación de estas membranas (temperatura, tiempo, solvente, etc.), así como también la de diferentes tratamientos posteriores de las membranas ya formadas. Se pudieron preparar membranas con espesores de hasta 20 micrones, con resistencia mecánica suficiente para operar a presiones superiores a la atmosférica.

Se estudiaron además diversas condiciones para la unión de estas membranas con los electrodos. El conjunto membrana-electrodos fue probado en celdas de combustible de hidrógeno/oxígeno con distintas temperaturas, presiones de operación y condiciones de humidificación. Se obtuvieron performances altamente satisfactorias con potencias del orden de  $1,2 \text{ W/cm}^2$  a un potencial de celda de  $0,6 \text{ V}$ , a  $80 \text{ }^\circ\text{C}$  y  $3 \text{ atm}$ .

La estabilidad de estas membranas finas frente al ciclado de la temperatura de la celda, comparada con la de membranas comerciales, también evidenció un comportamiento muy satisfactorio, como asimismo su estabilidad en experimentos de larga duración. Se realizó además el correspondiente ajuste de las curvas densidad de corriente-potencial de la celda a través de un modelo semiempírico.

**D85**  
**ORAL**

## ESTUDIO CINÉTICO DE LA DISOLUCIÓN DE ORO CON TIOUREA EN MEDIO ÁCIDO

**J. Oberholzer, C. San Sebastián, L.M. Gassa, C.A. Gervasi**

**Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)**

**Suc. 4, C.C. 16. 1900 La Plata. Argentina**

**E-mail: oberh@inifta.unlp.edu.ar**

El objetivo del trabajo es determinar las condiciones experimentales en las que una solución de tiourea acidificada podría competir, como un solvente alternativo a soluciones cianuradas, en el proceso de lixiviación de oro. Para esto es necesario determinar en detalle aspectos cinéticos y termodinámicos del sistema  $Au + (H_2N)_2CS + H_2SO_4$  en condiciones de operación industriales que al presente no se encuentran disponibles en la bibliografía. Las soluciones electrolíticas empleadas son termostatzadas a 25° C y desoxigenadas con  $N_2$ . Se varían la concentración de  $H_2SO_4$  en el alcance 0,001 - 0,1 M y la concentración de  $(H_2N)_2CS$  en el alcance 0,1314 - 13,14 mM.

Como electrodo de trabajo se utilizan discos rotantes de oro policristalino (0,071 cm<sup>2</sup>), previamente pulidos mecánicamente con alúmina (0,3 µm), enjuagados con agua tridestilada y ciclados en solución sulfúrica 0,1 M entre -0,66 V y 0,99 V (vs. electrodo de sulfato mercurioso saturado) a 100 mV s<sup>-1</sup>. Las velocidades de rotación del electrodo de oro se varían en el alcance 0 - 2000 rpm.

Se emplearon técnicas de polarización pseudo-estacionaria, voltametría cíclica a distintas velocidades de barrido de potencial y espectroscopía de impedancia electroquímica.

A partir de los resultados experimentales se derivan parámetros cinéticos del sistema estudiado (densidad de corriente de intercambio, coeficientes de transferencia y órdenes de reacción respecto de las especies consideradas). Estos son utilizados para seleccionar, por comparación con los valores que surgen del planteo de modelos teóricos de reacción, el modelo que representa más acabadamente la respuesta experimental.

**D86**  
**ORAL**

## ADSORCIÓN DE ÁCIDOS NUCLEICOS SOBRE ELECTRODOS DE CARBONO

**María Laura PEDANO y Gustavo A. RIVAS**

**INFIQC. Departamento de Físico Química. Facultad de Ciencias Químicas. U. N. C.**

**Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba.**

**E-mail: grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

En esta comunicación se discute la influencia de diferentes condiciones experimentales en la adsorción de distintos ácidos nucleicos sobre electrodos de carbono vítreo y pasta de carbono vítreo. Se discute el tipo de interacción (electrostática o hidrofóbica) predominante en dicho proceso. La detección de los ácidos nucleicos se realiza a través de la oxidación de los residuos guanina mediante "stripping" potenciométrico de adsorción a corriente constante.

Se estudia el efecto del tiempo y potencial de adsorción, concentración y tipo de ácidos nucleicos, secuencia y número de bases del oligonucleótido, fuerza iónica, así como la estabilidad de la capa adsorbida sometida a distintas condiciones de desorción. En ambos tipos de electrodos se observó un comportamiento similar para las condiciones estudiadas aunque la oxidación de guanina fue considerablemente menor sobre los electrodos compósito. La señal es prácticamente independiente del potencial de adsorción entre -0,40 V y +0,60 V y de la concentración del electrolito soporte ("buffer" acetato pH 5,00) entre 0,20 M y 0,80 M. Estos hechos, sumados al efecto negativo que presentan los pretratamientos oxidativos de la superficie en la adsorción de estas biomoléculas y al bajo porcentaje de hibridación observado con diferentes oligonucleótidos, indicarían que la interacción que presentan los ácidos nucleicos con la superficie de estos electrodos es de naturaleza más hidrofóbica que electrostática, a diferencia de lo que ocurre sobre electrodos de pasta de grafito.

D87

**DESARROLLO DE UN SENSOR ELECTROQUÍMICO  
PARA LA DETECCIÓN DE ANTICUERPOS  
ANTI-TRIPANOSOMA *cruzi*.**

**Lagier C.M.,<sup>1</sup> Alarcón S.H.,<sup>1</sup> Pagani D.,<sup>1</sup> Marcipar I.<sup>2</sup> y Marcipar A.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Dto. Química Analítica. FCByF, UNR. Suipacha 531. Rosario (2000). Argentina.

E-mail: [clagier@fbioyf.unr.edu.ar](mailto:clagier@fbioyf.unr.edu.ar)

<sup>2</sup> INTEBIO, Fac. Bioquímica y Cs. Biológicas. UNL. Paraje El Pozo. Santa Fe (3000).

Se diseñó un inmunoensayo enzimático con detección electroquímica para verificar la presencia de anticuerpos anti-Tripanosoma *cruzi*. El sensor se construyó a partir de electrodos de oro modificados con tiol sobre el que se unieron antígenos de Tripanosoma *cruzi*, obtenidos a partir de un homogenado del parásito. Los sitios no modificados del electrodo se bloquearon con caseína bovina y posteriormente, se expuso el electrodo a diluciones de suero Chagas positivo. La construcción del autoensamblado se concluyó, sumergiendo el electrodo en una dilución de anti-inmunoglobulina humana conjugada con una enzima redox que se liga al anticuerpo anti-Tripanosoma *cruzi*. La evaluación de la constitución del autoensamblado se realizó agregando el sustrato de la enzima sobre una solución de buffer conteniendo electrolito soporte, ante la presencia de un mediador soluble. Manteniendo un potencial catódico sobre el electrodo, se consiguió registrar una corriente catalítica indicativa de la reducción electroquímica del mediador que, actuando como co-sustrato, fue oxidado por reacción con la enzima conjugada.

Se evaluó el comportamiento del inmunosensor frente a distintas diluciones de suero Chagas positivo y frente a diluciones de sueros no reactivos.

D88

**ESTUDIO DE LA ELECTRODEPOSICION DE NIQUEL  
EN PRESENCIA DE ACIDO NICOTINICO**

**María Fernanda Mora y Gabriela I. Lacconi**

**INFIQC, Dpto. Fisicoquímica, Fac. Cs. Químicas, Universidad Nacional de Córdoba  
Pab. Argentina, Ala 1, Cdad. Universitaria (5000) Córdoba -Argentina**

E-mail: [fmora@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:fmora@fisquim.fcq.unc.edu.ar)

Numerosos estudios han mostrado que las propiedades físico-mecánicas de los recubrimientos de níquel dependen fuertemente de los parámetros de deposición y de la composición del baño. La participación de compuestos orgánicos en el mecanismo del proceso de electrodeposición proporciona determinadas características al depósito resultante. Estos compuestos orgánicos con distintos grupos funcionales actúan como agentes niveladores o abrillantadores de los recubrimientos.

En la presente comunicación se estudia la deposición de níquel sobre carbono vítreo en solución de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  y  $\text{H}_3\text{BO}_3$  en ausencia y presencia de ácido nicotínico. Mediante voltametría cíclica se observa que la deposición de níquel ocurre en forma conjunta con la reacción de formación de hidrógeno y se distinguen en el barrido anódico de potencial, los picos de corriente de oxidación de las especies  $\alpha\text{-Ni}$  y  $\beta\text{-Ni}$  formadas.

La presencia de ácido nicotínico no modifica el potencial donde comienza la nucleación de la nueva fase, sin embargo, la carga involucrada en los procesos de electroreducción es mucho mayor que en su ausencia. La electroreducción del aditivo depende del pH de la solución y ocurre a potenciales negativos respecto a la deposición de níquel.

D 89 RETIRADO

D90

**ESTUDIOS STM-*IN SITU* DE LA  
ELECTRODEPOSICIÓN DE Cd SOBRE Au(111)**

**M.C. del Barrio, S. G. García y D. R. Salinas**

**Inst. de Ing. Electroquímica y Corrosión - Universidad Nacional del Sur.  
Avda. Alem 1253. (8000) Bahía Blanca. Argentina.**

**E-mail: [dsalinas@criba.edu.ar](mailto:dsalinas@criba.edu.ar)**

El proceso de electrodeposición metálica constituye una de las tecnologías importantes para la obtención, en forma controlada, de películas delgadas y uniformes. En este sentido, la deposición a subpotencial (*upd*) de metales sobre sustratos diferentes provee superficies modificadas ordenadas, con propiedades adecuadas para su utilización en electrocatalisis, electrodeposición de aleaciones, etc.

En este trabajo se estudió el proceso de deposición a subpotencial de Cd en el sistema Au(111)/Cd<sup>2+</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, empleando técnicas electroquímicas convencionales y Microscopía por Efecto Túnel (STM) *in-situ*.

Los voltammogramas registrados en la zona de *upd* indicaron la presencia de una etapa de adsorción superficial con formación de aleación a potenciales cercanos al de la formación de la fase 3D. Las imágenes STM de la superficie del Au(111) mostraron terrazas suaves de altura monoatómica. Luego del pico de adsorción de Cd se aprecian cambios morfológicos sustanciales, observándose el crecimiento lateral de las terrazas y la formación de islas de altura monoatómica. Las imágenes STM con resolución atómica obtenidas en esta zona de subpotenciales mostraron estructuras hexagonales con espaciado  $d \approx 0,3 \pm 0,01$  nm lo que indicaría la formación de una fase condensada Au(111)/(1x1)Cd. A subpotenciales más cercanos al de equilibrio se observa un rápido crecimiento de las terrazas lo que se correspondería con el proceso de formación de la aleación superficial. Este proceso es corroborado por la aparición de picaduras e islas monoatómicas al polarizar la superficie a subpotenciales suficientemente positivos.

D91

**FORMACIÓN DE ALEACIÓN SUPERFICIAL EN EL SISTEMA  
Ag(111)/Cd<sup>++</sup> DURANTE EL PROCESO DE UPD**

**S. G. García y D. R. Salinas**

**Instituto de Ing. Electroquímica y Corrosión - Universidad Nacional del Sur  
Avda. Alem 1253 - (8000) Bahía Blanca - Argentina.**

**E-mail: [sgarcia@criba.edu.ar](mailto:sgarcia@criba.edu.ar)**

El estudio de aleaciones superficiales resulta de importancia básica y tecnológica para el entendimiento de los mecanismos de formación de capas heteroepitaxiales metal-metal y de su influencia sobre las propiedades catalíticas de la superficie.

El objetivo del presente trabajo es analizar, mediante técnicas electroquímicas convencionales y STM *in situ*, el proceso de formación de aleación superficial en el sistema Ag(111)/Cd<sup>2+</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, durante la deposición a subpotencial (UPD).

Las experiencias de voltametría cíclica realizadas mostraron irreversibilidades en el proceso de UPD, con asimetría de los picos de sorción anódico y catódico en la región de subpotenciales  $\Delta E < 100$  mV. A mayor tiempo de polarización a un subpotencial fijo, aumenta la carga anódica asociada con la remoción del Cd, indicando la formación superficial de la aleación Ag-Cd. Mediante STM *in situ*, se ha observado que el primer estadio de la deposición de Cd ocurre en los escalones de las terrazas monoatómicas de la superficie. Luego de la remoción de Cd durante el barrido anódico se forman picaduras monoatómicas e islas en la superficie de Ag, corroborando la formación de aleación superficial. Esto indicaría que a medida que dicha aleación se forma y el Cd difunde hacia el interior de la superficie, la Ag se desplaza lateralmente hacia el exterior. La remoción de Cd, por lo tanto, no causa la retracción de los bordes del escalón a sus posiciones originales, sino que deja las terrazas extendidas y con picaduras. La persistencia de islas después de la remoción de Cd es evidencia del intercambio vertical entre Ag y Cd. La formación de picaduras alrededor y aún dentro de las islas que permanecen después de la remoción de Cd, confirmaría este mecanismo.

D92

**INFLUENCIA DEL TRATAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE CARBONO  
VÍTREO EN LA DEPOSICIÓN DE Cu. ESTUDIO POR AFM.**

**A. E. Alvarez, S. G. García, M. M. E. Duarte, D. R. Salinas y C. E. Mayer.**

**Inst. de Ing. Electroquímica y Corrosión -**

**Universidad Nacional del Sur, Avda. Alem 1253. (8000) Bahía Blanca. Argentina.**

**E-mail: [mduarte@criba.edu.ar](mailto:mduarte@criba.edu.ar)**

El carbono vítreo (CV) es ampliamente utilizado como soporte de electrocatalizadores debido al elevado sobrepotencial para el desprendimiento de hidrógeno y sus características de material inerte. Sus propiedades superficiales son afectadas por la presencia de grupos funcionales conteniendo oxígeno (óxidos superficiales), los cuales influyen sobre la actividad, estabilidad y área activa de los catalizadores. La concentración y naturaleza de dichos óxidos puede modificarse por pre-tratamiento de oxidación-reducción. En este trabajo se analizan los estadios iniciales de la electrodeposición de Cu sobre CV, con el objeto de establecer la influencia que ejerce un pre-tratamiento electroquímico de oxidación superficial sobre la nucleación, crecimiento y morfología del depósito resultante.

Las experiencias se han realizado sobre CV pulido y CV pulido y oxidado durante 5 minutos a 2 V/ECS y posteriormente reducido hasta -1 V/ECS, en solución 0,5 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, pH=2. Los estudios de electrodeposición de Cu se han desarrollado en una solución similar a la anterior, conteniendo además 0,02 M CuSO<sub>4</sub>, empleando técnicas electroquímicas convencionales junto con AFM y SEM.

Los resultados de los transientes potencioestáticos, para los dos estados superficiales indicados del CV, muestran que el proceso de deposición de Cu puede describirse a través del modelo de nucleación sobre sitios activos, con crecimiento 3D controlado por difusión. Para el caso del CV modificado, las densidades de corriente fueron mayores, con el máximo característico de estos procesos ubicado a tiempos más cortos. El análisis por SEM y AFM, de la morfología y tamaño de los cristales indicó, que en el caso de CV sin oxidar se desarrolló una gran cantidad de pequeños núcleos equiaxiales, poliédricos, de tamaño similar, distribuidos uniformemente; mientras que para el CV modificado se formaron cristales de mayor tamaño con estructura de tipo dendrítica.

D93

### ESTADIOS INICIALES DE LA ELECTRODEPOSICIÓN DE Zn SOBRE HOPG EN PRESENCIA DE GELATINA

A. E. Alvarez y D. R. Salinas.

**Instituto de Ingeniería Electroquímica y Corrosión - Universidad Nacional del Sur.  
Avda. Alem 1253. (8000) Bahía Blanca. Argentina. E-mail: ealvarez@criba.edu.ar**

En los procesos de electrodeposición de Zn sobre sustratos diferentes se utiliza una gran variedad de baños electrolíticos conteniendo distintos aditivos, cuyo objetivo es controlar el crecimiento catódico del depósito, inhibiendo la formación de dendritas y produciendo un depósito suave y de grano fino. Particularmente, moléculas orgánicas tales como proteínas o gomas de origen animal, facilitan la formación de monocapas uniformes con baja rugosidad. Los primeros estadios del proceso de electrogalvanizado son de gran importancia ya que, en muchos casos, condicionan la morfología y propiedades fisicoquímicas finales del depósito. El objetivo del presente trabajo fue analizar los estadios iniciales de la electrodeposición de Zn en medio ácido acuoso, conteniendo iones  $\text{SO}_4^{2-}$  en presencia y ausencia de gelatina empleada como agente nivelante. Para ello se han utilizado técnicas electroquímicas convencionales, AFM y SEM. Se ha empleado HOPG como sustrato, considerando su elevado sobrepotencial para el desprendimiento de hidrógeno y su superficie plana, relativamente fácil de preparar y observar por AFM. En presencia de gelatina, los voltamogramas indican que se requiere un mayor sobrepotencial para iniciar la deposición metálica, en tanto los transientes potencioestáticos muestran que, de un proceso de nucleación instantánea en ausencia de aditivo, se pasa a uno de nucleación progresiva, con el agregado de gelatina. De los resultados se deduce un efecto de "bloqueo superficial", en especial de los sitios activos, provocado por el aditivo, lo cual es claramente corroborado por AFM. El efecto nivelante de la gelatina se observa en los estudios por AFM y SEM, ya que las imágenes obtenidas en el sistema con aditivo, presentan un estado superficial plano, con depósitos más densos y de granos mucho más finos con respecto a los cristales típicos del Zn.

D94

### INFLUENCIA DE LOS ADITIVOS EN LA ELECTRODEPOSICIÓN DE CINC EN MEDIO ACIDO

Zulema A. Mahmud<sup>(1)</sup>, Gabriel Gordillo<sup>(2)</sup> y Carlos Ventura Dalkaine<sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup> INTI, Av. General Paz 1599, (1650) San Martín, Buenos Aires.

<sup>(2)</sup> DQIAQE, Fac. de Cs. Exactas y Naturales, UBA, C. Universitaria, Pabellón 2.

<sup>(3)</sup> Universidad Federal de Sao Carlos, UFSCar, Sao Pablo, Brasil.

E-mail: zulema@inti.gov.ar

En el presente trabajo se estudia la electrodeposición de cinc en medio ácido sobre acero 1010 en presencia y ausencia de aditivos. La adición de aditivos a los baños ácidos de  $\text{ZnCl}_2 + \text{NH}_4\text{Cl}$  es indispensable para obtener depósitos de calidad adecuada. Para optimizar las condiciones de electrodeposición en presencia de un determinado aditivo es importante entender su mecanismo de acción. Por esta razón se estudia la electrodeposición de cinc en presencia y ausencia de tiourea.

Se utilizan técnicas electroquímicas como la voltametría cíclica, de onda cuadrada, de redisolución, saltos potencioestáticos, galvanostáticos, etc. Se encuentra que el agregado de tiourea en bajas concentraciones (desde  $5 \cdot 10^{-5}$  M), disminuye la corriente de reducción de protones sobre el sustrato que se observa en ausencia de aditivo a  $-0,9$  V vs calomel. Paralelamente disminuye la respuesta correspondiente a la nucleación y retrasa el potencial de inicio de la zona de transferencia de carga. La densidad de corriente del pico a  $-1,2$  V vs calomel (deposición masiva) aumenta en aproximadamente un 10 %. Estos efectos se correlacionan con la adsorción del aditivo, la cual es estudiada aplicando técnicas de impedancia. Las estructuras y el análisis de los depósitos se realizan por el microscopía electrónica de barrido (SEM) con muestras preparadas en Celda de Hull a una densidad de corriente de  $10 \text{ mA cm}^{-2}$  en el centro del cátodo.

D95

## REACCION DE HIDROGENACION DE CHALCONA

**M.Gutierrez, N.Nazareno, B.A.Lopez de Mishima y H.Mishima**  
**Instituto de Ciencias Químicas, F.A.A.Universidad Nacional de Santiago del Estero, Av. Belgrano Sud 1912 ,4200 Santiago del Estero**  
**E-mail: criboldi@unse.edu.ar**

Con el objeto de optimizar las condiciones de la hidrogenación electrocatalítica de las chalconas, se comenzó el estudio sintetizando las chalconas a partir de acetofenona y benzaldehído, y propiofenona y benzaldehído en una solución de hidróxido de potasio-etanol teniendo en cuenta que la descomposición de las chalconas se producen en medio alcalino, la hidrogenación de la chalcona se llevó a cabo utilizando etanol como solvente.

La reacción de hidrogenación se realiza utilizando una celda de dos compartimientos, donde una lámina de paladio sirve al mismo tiempo, como electrodo de trabajo para la producción de hidrógeno activo que pasa a través de la lámina y como separador del compartimiento donde se produce la hidrogenación de la chalcona.

La hidrogenación es seguida por espectrofotometría UV-visible para diferentes corrientes y tiempos de producción de hidrógeno. La evaluación de los primeros resultados conducen a que la reacción de hidrogenación sería de segundo orden.

Por otro lado los productos de reacción son analizados por cromatografía en fase gaseosa.

D96

## REDUCCION ELECTROQUIMICA DE DIOXIDO DE CARBONO SOBRE CATALIZADORES METALICOS

**S.Pettinicchi, R.Mignone, C.A.Cattaneo, B.A.Lopez de Mishima y H.Mishima**  
**Instituto de Ciencias Químicas, F.A.A., Universidad Nacional de Santiago del Estero, Av. Belgrano Sud 1912, 4200 Santiago del Estero**  
**E-mail: susana@wayranet.com.ar**

En la actualidad ha aumentado el interés en el estudio de la reducción electroquímica de  $\text{CO}_2$  porque es una ruta apropiada para el consumo de  $\text{CO}_2$  y su transformación en hidrocarburos útiles, así muchas de las investigaciones están dirigidas a estudiar su electroreducción sobre electrodos metálicos. Las aleaciones metálicas son buenos catalizadores para las reacciones de oxidoreducción de compuestos orgánicos y en particular las aleaciones de los metales nobles han sido utilizadas como electrodos en las celdas de combustible. El aleado mecánico es una técnica que ha sido desarrollada para combinar metales y resulta atractiva para la producción de materiales para ser utilizados en reacciones heterogéneas. El propósito del presente trabajo es estudiar las acciones de las aleaciones de Cu-Zn y Cu-Sn como catalizadores en la reacción de electroreducción de  $\text{CO}_2$ . Estas aleaciones han sido preparadas por aleado mecánico y por fusión a partir de metales puros, la composición de las aleaciones han sido analizadas por SEM-EDAX y las estructuras determinadas por XRD. Utilizando técnicas de cromatografía gaseosa se identifican los productos de reacción de reducción los cuales son compuestos de bajo peso molecular como ácido fórmico, metanol, acetona, etanol, etc. que depende del tipo de aleación utilizada como electrodo.

**D97**

**ELECTRODEPOSICION A SUBPOTENCIALES DE IONES METÁLICOS SOBRE ELECTRODOS MODIFICADOS CON MONOCAPAS AUTO-ORGANIZADAS.**

**M. Cipollone, J. L. Frayse, M. H. Fonticelli, R. C. Salvarezza, M. E. Martins.**

**Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, Universidad Nacional de La Plata–Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas)  
Sucursal 4, Casilla de Correo 16, (1900) La Plata, Argentina.**

**E-mail: [mmartins@inifta.unlp.edu.ar](mailto:mmartins@inifta.unlp.edu.ar)**

Se investiga la electrodeposición de iones metálicos a nivel de la monocapa o submonocapa sobre sustratos metálicos extraños cubiertos por monocapas auto-organizadas. El interés en edificar estos sistemas complejos reside en tratar de establecer y determinar la naturaleza y la magnitud de la interacción entre el sustrato y las moléculas de la capa auto-organizada a través de la competición con distintos iones metálicos. La electrodeposición de metales a subpotenciales se utiliza para estimar el grado de interacción entre moléculas auto-organizadas y el sustrato, discriminar entre moléculas fisisorbidas o quimisorbidas y el nivel de defectos presentes. En una primera etapa se estudia el electrodepósito de talio, plomo y cobre sobre electrodos de oro policristalino y oro (111), en soluciones acuosas de los iones en concentraciones 1mM en 0.1 M de electrolito soporte (NaOH, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, HClO<sub>4</sub>). Posteriormente el electrodepósito de esos iones se realiza sobre fracciones de capa y de monocapas auto-organizadas de alcanotioles preparadas bajo distintas condiciones experimentales. Para el estudio del depósito de los metales a subpotenciales sobre oro y oro cubierto con alcanotioles como así también para la desorción de las monocapas auto-organizadas, se emplean técnicas voltamperométricas.

**D98**

**ESTUDIO ELECTROQUIMICO DEL CATECOL ADSORBIDO SOBRE ORO**

**S. M. Esquenoni, A. E. Von Mengershausen y M. G. Sustersic**

**Facultad de Ingeniería y Ciencias Económico-Sociales. Universidad Nacional de San Luis. 25 de Mayo 384. 5730 Villa Mercedes (San Luis). [masus@fices.unsl.edu.ar](mailto:masus@fices.unsl.edu.ar)**

Las sustancias orgánicas que presentan anillos aromáticos con grupos OH en posiciones orto y para se oxidan de tres maneras distintas: una, a potenciales bajos, donde se oxidan reversiblemente los grupos OH del anillo, otra, a potenciales intermedios, donde se adiciona oxígeno al anillo y una tercera, a potenciales altos, donde se rompen los enlaces carbono-carbono. Aquí, se estudia el primer tipo de reacción. El comportamiento electroquímico del catecol es similar al de la hidroquinona, con la diferencia de que la oxidación reversible ocurre a un potencial ligeramente mayor (0,75 V referidos al electrodo reversible de hidrógeno). Esto se debe a la repulsión mutua de los electrones sin aparear sobre los átomos de oxígeno de los grupos OH, que se encuentran muy próximos entre sí. Además, la reacción es, por el mismo motivo, un poco menos reversible. El hecho de que el compuesto presente menor simetría, contribuye a este efecto. En este trabajo, no se encuentran evidencias de la formación de un complejo de transferencia de carga, como la quinhidrona en el caso del par hidroquinona/benzoquinona. Este complejo, adsorbido débilmente sobre la superficie, es el responsable de la alta reversibilidad del mencionado par. La adsorción del catecol es débil en un principio, consolidándose el enlace con el tiempo para formar una ligadura tipo  $\pi$ . Se determina un área por molécula de 47 Å<sup>2</sup>, similar a la obtenida para la hidroquinona. El dispositivo experimental es similar al descrito previamente (Inf. Tecn. 11, (2000)71-77).

D99

**ESTUDIO ELECTROQUÍMICO y ESTRUCTURAL DE MONOCAPAS DE ALCANOTIOLES SOBRE SUSTRATOS DE Cu POLICRISTALINO y Cu (111).**

**A. Ferral, F. E. Morán, E. M. Patrito y V. A. Macagno**

**INFIQC. Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. (5000) Córdoba.**

**E-mail: [anabella@fisquim.fcq.unc.edu.ar](mailto:anabella@fisquim.fcq.unc.edu.ar)**

En la industria química y microelectrónica el cobre es un metal muy importante debido a sus propiedades térmicas y eléctricas y a su bajo costo. Para lograr un uso eficiente en estas aplicaciones es esencial el desarrollo de películas finas que lo protejan de la corrosión. Las monocapas autoensambladas (SAMs) formadas a partir de la quimiadsorción de alcanotioles sobre superficies metálicas es una de las alternativas de modificación superficial más conveniente descubierta en los últimos tiempos.

En este trabajo se comparan las propiedades estructurales y electrónicas de monocapas de hexanodecanotiol y ácido 16-mercaptohexadecanoico sobre superficies de Cu policristalino y Cu(111) en soluciones 0,1 M de  $\text{HClO}_4$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$  y  $\text{NaCl}$ . Para ello se utilizaron técnicas electroquímicas (voltametría cíclica y espectroscopia de impedancia) y microscópicas (AFM y STM), las cuales combinadas constituyen una herramienta clave para la determinación de mecanismos en procesos de corrosión. Se observa que el pretatamiento del electrodo determina en gran medida el grado de empaquetamiento y la reproducibilidad de las monocapas y en todos los casos las películas terminadas en ácidos carboxílicos son menos protectoras que las correspondientes terminadas en grupos metilos. El objetivo futuro es utilizar SAMs como adhesivos entre la superficie de Cu y la de otra matriz orgánica, inorgánica o mixta.

D100

**ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD ELECTROQUIMICA Y ORIENTACION MOLECULAR DE SISTEMAS AUTOENSAMBLADOS POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA IN-SITU.**

**Cecilia Bonazzola, Francisco Carlos Nart**

**Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo. C.P. 780-13560-970- São Carlos, SP-Brazil.**

**INQUIMAE, DQIAQF, FCEN – Universidad de Buenos Aires. C. Universitaria. Pabellón II. AR-1428 Buenos Aires. Argentina. Email: [cecilia@qi.fcen.uba.ar](mailto:cecilia@qi.fcen.uba.ar)**

Los tioles (HSR) se emplean ampliamente para modificar superficies de oro con diferentes aplicaciones. En particular, los tioles funcionalizados son útiles para anclar superestructuras a la superficie de Au como en el caso de la formación de multicapas de polímeros autoensamblados electrostáticamente. La estabilidad de las películas depende de la integridad de la unión S-Au.

En este trabajo se estudió la estabilidad electroquímica en función del potencial aplicado, en solución acuosa, empleando 3-mercaptopropanosulfonato como modificador de superficie, por espectroscopia infrarroja "in-situ". Los resultados sugieren re-orientación del tiol quimisorbido en la superficie: la banda correspondiente al modo  $\nu_s\text{-SO}_3^-$  se mueve a baja frecuencia en el intervalo de potenciales correspondiente a la doble capa del sustrato de oro y no se observa la banda correspondiente al modo  $\nu_s\text{-SO}_3^-$ . A potenciales más positivos los resultados indican la desorción oxidativa del tiol, observándose bandas anchas de especies en solución que sugieren la presencia de  $\text{SO}_4^{2-}$  y/o  $\text{HSO}_4^-$  dependiendo del pH de la solución.

**D101**

**ORAL**

**ADSORCIÓN DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS SOBRE TiO<sub>2</sub>**

**EFFECTO DEL POTENCIAL**

**Mauricio E. Calvo, Cecilia Bonazzola y Sara A. Bilmes**

**INQUIMAE-DOIAQF; FCEyN- UBA, Ciudad Universitaria Pab. II (C1428EHA)**

**Buenos Aires. E-mail: sarabil@qi.fcen.uba.ar**

La adsorción de ácidos carboxílicos sobre TiO<sub>2</sub> es un paso relevante en la fotoelectroquímica de estos compuestos que interviene en el diseño de dispositivos basados en TiO<sub>2</sub> como celdas solares, fotocatalíticas, sensores, etc. En interfases sólido/líquido se conoce bien la estructura de los complejos superficiales y su dependencia con el pH cuando el proceso se realiza con partículas de TiO<sub>2</sub> con alta área superficial. Para monocristales o films, sólo existen algunas evidencias indirectas de la adsorción y su dependencia con el potencial.

En este trabajo se analiza la influencia del potencial en la adsorción de distintos carboxilatos (salicilato, oxalato, nicotinato, malonato) por espectroscopía IR de reflexión-absorción *in-situ* FTIRRAS. La adsorción se realiza sobre películas delgadas de TiO<sub>2</sub> depositadas sobre Ti por *spin-coating*, en una celda electroquímica de capa delgada con ventana de CaF<sub>2</sub>.

En todos los casos se observa que a potenciales negativos hay un aumento de la intensidad de absorción de la banda asignada a  $\nu_s(-CO_2^-)$  en solución con simultánea disminución de la asignada a  $\nu(R-CO)$ , característica del complejo superficial. También se observa una notoria disminución de las bandas de absorción asociadas con agua "libre" y aniones en la capa delgada. Los resultados confirman que a potenciales negativos hay un aumento del pH local que induce la desorción del carboxilato y que, simultáneamente, aumenta la hidrofobicidad de la superficie.

**D102**

**ORAL**

**OXIDACION DE AMONIACO SOBRE ELECTRODOS DE ALEACIONES DE PLATINO-IRIDIO**

**F. E. Morán, C. Cattáneo, H. T. Mishima, P. Silvetti (\*) y B. A. López de Mishima**  
**Instituto Cs, Químicas, F.A.y A. UNSE. Av. Belgrano Sud 1912. 4200 .Santiago**  
**Estero. (\*) FAMAF. UNC. E-mail: bmishima@unse.edu.ar**

En el presente trabajo se estudia la preparación y caracterización de aleaciones de Pt-Ir y su aplicación a la oxidación de amoníaco. Se analiza también el comportamiento electroquímico de los adsorbatos.

Las aleaciones se prepararon por reducción química, aleado mecánico y electrodeposición. Se caracterizaron por difracción de rayos X, análisis Auger y SEM-EDAX. En todos los casos se obtuvieron aleaciones por sustitución sólida y con estructura f.c.c. Algunos depósitos muestran orientaciones en el difractograma y fue posible calcular la textura.

Las experiencias realizadas con DEMS muestran en principio la presencia de nitrógeno como producto principal de la oxidación de amoníaco. Por otra parte en algunos electrodepositos los difractogramas muestran modificación en la textura después de ser utilizados en la oxidación de amoníaco.

Los estudios con los adsorbatos se efectuaron en una celda de flujo y los adsorbatos obtenidos a diferentes potenciales de adsorción fueron oxidados y reducidos para realizar un análisis de las cargas con el potencial. Las cargas de oxidación muestran un máximo para  $E_{red} = 0.4$  V lo que indicaría que a potenciales mayores el adsorbato que se forma es poco oxidable.

Los resultados estarían en principio en acuerdo con los obtenidos en platino e iridio

**D103**  
**ORAL**

**ELECTROFORMACIÓN DE DENDRITAS METÁLICAS  
EN MEDIOS  
ACUOSOS ESTRUCTURADOS**

**Miguel A. Pasquale, Susana L. Marchiano y Alejandro J. Arvia**  
**Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas.**  
**INIFTA**

**Diag. 113 y 64. LaPlata E.mail : miguelp@inifta.unlp.edu.ar**

Se estudia la electrodeposición de plata bajo régimen difusional, a potencial constante, para determinar la influencia de la estructura de medios gelificados en la cinética y modo de crecimiento de depósitos metálicos ramificados. Para ello se determina la relación entre la velocidad de avance del frente del depósito en crecimiento y la fuerza impulsora del proceso. En un medio de estructura al azar de islas y canales microscópicos, de tamaño promedio menor que 0.5 mm, con una distribución quasi-homogénea, la velocidad de avance se frena por los obstáculos existentes en el medio (*pinning*). El aumento de la fuerza impulsora por encima de un valor crítico produce un aumento de la velocidad de avance y se alcanza la región de transición "*pinning-depinning*". Finalmente, para una altura promedio del depósito del orden de 2 mm, la velocidad de crecimiento tiende a una dependencia lineal con la fuerza impulsora, como lo prevé el modelo de Kardar, Parisi y Zhang (KPZ). Un medio con estructura anisotrópica en forma de islas y canales con una amplia distribución de tamaños, frena inicialmente la velocidad del frente y, a medida que el crecimiento se desarrolla dentro de los canales de mayor tamaño, la densidad aparente de las ramas metálicas crece, el número de ramas disminuye y el sistema se aparta de las condiciones previstas por el modelo KPZ. Estos resultados aclaran aspectos de la cinética de la formación de dendritas metálicas, y el papel que juega la transferencia de materia en el proceso global.

**D104**  
**ORAL**

**NUEVAS ESTRATEGIAS EN LA DETECCIÓN DEL  
EVENTO DE HIBRIDACIÓN**

**Abdel-Nasser KAWDE<sup>1</sup>, Ronen POLSKY<sup>1</sup>, Joseph WANG<sup>1</sup> y Gustavo A. RIVAS<sup>2</sup>**  
**<sup>1</sup>Chemistry and Biochemistry Department, New Mexico State University, Las Cruces,**  
**88003, NM, USA**

**<sup>2</sup>INFIQC. Departamento de Físico Química. Facultad de Ciencias Químicas.**  
**Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba.**

**E-mail: grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

En esta comunicación se discuten las ventajas de la asociación de una eficiente separación magnética con diferentes alternativas de transducción para detectar secuencias del gen BRCA1 relacionados con el cáncer de mama.

Las diferentes etapas involucran la construcción de la capa de bio-reconocimiento mediante la inmovilización del oligonucleótido sobre esferas magnéticas cubiertas por estreptavidina, seguida de la hibridación y separación magnética de los oligonucleótidos que no hibridaron. Los pasos posteriores dependen del esquema de transducción. En este caso se discuten diferentes alternativas, la interacción del híbrido con enzimas capaces de generar compuestos electroactivos y la posterior determinación cronopotenciométrica del producto de reacción; la interacción de oro coloidal unido a estreptavidina seguido de la detección mediante "stripping" potenciométrico o la interacción del híbrido con partículas de látex y su posterior detección mediante microscopía.

Estos nuevos esquemas de detección del evento de hibridación presentan las ventajas de permitir una excelente selectividad, el uso de pequeños volúmenes de reactivos y la posibilidad de efectuar numerosos ensayos simultáneos y de emplear diferentes modos de transducción.

D106

**COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DEL ACERO INOXIDABLE 304L BAJO LA INFLUENCIA DE BIOFILMS FOTOSINTÉTICOS EN AGUA DE MAR NATURAL.**

**D. M. Ruíz, S. Simison, y J.P. Busalmen. División Corrosión, INTEMA-CONICET, UNMdP. Juan B. Justo 4302, B7608FDQ, Mar del Plata, Argentina.  
E-mail: [jbusalme@fi.mdp.edu.ar](mailto:jbusalme@fi.mdp.edu.ar).**

El desarrollo de poblaciones microbianas sobre superficies metálicas expuestas a aguas naturales ocasiona numerosos problemas entre los que se cuentan las fallas por corrosión localizada. Este tipo de fallas ha sido relacionado con el fenómeno de ennoblecimiento del potencial de corrosión que se observa como consecuencia de la formación de biofilms, y afecta principalmente a metales con comportamiento activo-pasivo como el titanio y los aceros inoxidable cuando se los expone a agua de mar natural.

En este trabajo se evaluó el comportamiento electroquímico del acero inoxidable 304L bajo la influencia de biofilms fotosintéticos naturales desarrollados a partir de agua de mar en condiciones de laboratorio. El crecimiento de la población microbiana se determinó mediante la cuantificación de ADN, ARN, proteínas y pigmentos fotosintéticos. A la vez que se registraron las variaciones en el potencial de corrosión y en la respuesta en impedancia electroquímica de las muestras con el tiempo de exposición. Resultados preliminares indican que el comportamiento electroquímico es afectado por la presencia de los biofilms. Los potenciales de corrosión se incrementaron desde valores cercanos a los  $-200$  mV(SCE) hasta valores de hasta  $95$  mV(SCE) luego de  $120$  h de exposición a agua natural en condiciones de iluminación continua. Cuando la interfase se analizó por espectroscopia de impedancia se observaron cambios a altas frecuencias en función de la tasa de iluminación. Durante la observación al microscopio óptico se observó un fuerte ataque localizado en forma de crevice y picado. El conjunto de los resultados obtenidos indica que los microorganismos fotosintéticos juegan un papel fundamental en los fenómenos observados.

D107

**DISEÑO Y CARACTERIZACION DE NUEVAS ALEACIONES DE TIPO AB<sub>2</sub> FORMADORAS DE HIDRUROS METALICOS**

**A. VISINTIN<sup>(1)</sup>, A. BONESI<sup>(1)</sup>, H. PERETTI<sup>(2)</sup> Y W.E. TRIACA<sup>(1)</sup>**

**(1) Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata C.C 16, Suc. 4, (1900) La Plata**

**E-mail: [bonesi@inifta.unlp.edu.ar](mailto:bonesi@inifta.unlp.edu.ar)**

**Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, C.C. 439 - Av. E. Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche**

Este trabajo está orientado al diseño y caracterización de compuestos intermetálicos con nuevas fases catalíticamente activas para la reacción del electrodo de hidrógeno.

Se prepararon dos aleaciones intermetálicas por fusión en horno de arco y se caracterizaron por difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectroscopia de dispersión de energía (EDS). Una de las aleaciones,  $Zr_{0.9}Ti_{0.1}Ni_1Mn_{0.5}Cr_{0.4}V_{0.1}$ , presenta buenas características para la absorción de hidrógeno como hidruro metálico. La otra aleación,  $36\%$  Zr -  $64\%$  Ni, genera fases Zr - Ni electrocatalíticamente activas para la reacción de formación de hidruros metálicos.

Con estas aleaciones se prepararon nuevas muestras con y sin adición de Pt, procediendo a su caracterización mediante técnicas electroquímicas para evaluar las mejoras en sus propiedades electrocatalíticas y de resistencia a la corrosión. Se determinó también su comportamiento bajo ciclado de carga- descarga y a distintas velocidades de descarga.

**D108**  
**ORAL**

**MEJORAMIENTO DE LAS PROPIEDADES  
ELECTROCATALITICAS DE ALEACIONES FORMADORAS  
DE HIDRUROS POR ADICION DE Pt, Pd y Ni**

**A. VISINTIN<sup>1</sup>, D. BARSELINI<sup>1</sup>, W. E. TRIACA<sup>1</sup>, M. P. SORIAGA<sup>2</sup>, C. WANG<sup>3</sup> y A. J. APPLEBY<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), UNLP  
Suc. 4, C.C. 16 (1900), La Plata, Argentina

E-mail: avisintin@inifta.unlp.edu.ar

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA

<sup>3</sup>Center for Electrochemical Systems and Hydrogen Research, Texas A and M  
University, College Station Texas 77843, USA

Este trabajo está orientado a la mejora de las propiedades de aleaciones metálicas formadoras de hidruros en soluciones alcalinas, que se utilizan en baterías recargables avanzadas. Se estudió el efecto de la adición de diferentes polvos metálicos, tales como Pt, Pd y Ni, a aleaciones del tipo AB<sub>5</sub> sobre su comportamiento bajo ciclado de carga-descarga. Se determinó que el proceso de activación de las aleaciones resulta notablemente acelerado por la adición de los polvos metálicos. Durante los sucesivos ciclos de carga-descarga, la capacidad de las aleaciones aumenta al tiempo que los sobrepotenciales disminuyen, por reducción de los óxidos superficiales formados durante su exposición al aire. Por otra parte, los electrocatalizadores Pd, Pt y Ni aceleran la reacción de transferencia de carga que ocurre en la superficie de la aleación y que determina la velocidad global del proceso de hidruración/ deshidruración. A través de medidas de impedancia faradaica se determinó que la cinética del proceso global de formación de hidruro metálico resulta favorecida por el agregado de los catalizadores metálicos.

**D109**

**ESTUDIO DE LAS CARACTERISTICAS OPERATIVAS DE UNA  
BATERIA DE Ni-H<sub>2</sub> DE USO ESPACIAL BAJO  
CONDICIONES SIMULADAS DE VUELO**

**G. GARAVENTTA, A. BONESI, A. VISINTIN Y W.E. TRIACA**

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Facultad de Ciencias  
Exactas, Universidad Nacional de La Plata

C.C 16, Suc. 4 (1900) La Plata, Argentina.

E-mail: garaventa@inifta.unlp.edu.ar

Se realizaron actividades cooperativas con la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE), sobre el tema de baterías avanzadas basadas en tecnologías del hidrógeno. Se estudió el comportamiento de una celda de níquel-hidrógeno de uso espacial, similar a las utilizadas en el satélite SAC-C, bajo ciclado de carga-descarga, en autodescarga y con corriente de mantenimiento, determinando los parámetros operativos de la celda. Con la información recopilada durante los estudios realizados se elaboró el "Manual de Comportamiento en Operación de Baterías de Níquel-Hidrógeno para Misiones Espaciales", que incluye normas para garantizar una operación normal y segura del paquete de baterías del satélite SAC-C.

Posteriormente al lanzamiento y hasta la fecha, se han realizado estudios comparativos entre la información de la telemetría de vuelo de las baterías del SAC-C, aportada por CONAE, y los resultados de la investigación bajo condiciones simuladas de vuelo, realizada en INIFTA, que han permitido elaborar indicadores del estado de funcionamiento de las baterías.

**D110**

**NUEVOS ELECTRODOS PARA CELDAS DE  
COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO DE TEMPERATURA  
INTERMEDIA**

**D.G. Lamas, G.E. Lascalea, R.E. Juárez, M.E. Rapp y N.E. Walsøe de Reca  
CINSO (Centro de Investigaciones en Sólidos), CITEFA-CONICET  
Juan Bautista de La Salle 4397, (B1603ALO) Villa Martelli, Pcia. de Bs. As.  
E-mail: [dlamas@citefa.gov.ar](mailto:dlamas@citefa.gov.ar)**

Aunque el hidrógeno ha sido considerado "el combustible del futuro", es difícil que se logre su uso generalizado a corto plazo debido al problema de su almacenamiento y a su elevado costo. En los próximos años se espera que se continúen empleando hidrocarburos como combustibles. En este sentido, las celdas de combustible de óxido sólido tienen gran interés porque pueden reformar algunos hidrocarburos, como el metano, en forma interna (en el ánodo de la celda). Se evita, por lo tanto, introducir una etapa de "reformado" externa, que es necesaria en los otros tipos de celdas y que causa un aumento de complejidad y costo. La desventaja que tienen estas celdas es su alta temperatura de operación (800-1000°C), pero en los últimos años se han encontrado nuevos electrolitos sólidos por óxido de alta conductividad a "temperaturas intermedias" (500-800°C). En este trabajo se presentarán los avances realizados en el Centro de Investigaciones en Sólidos (CINSO), CITEFA-CONICET, sobre nuevos materiales para electrodo de celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia. Fundamentalmente se estudian electrodos basados en conductores mixtos nanoestructurados de alta área específica. El interés en los conductores mixtos se debe a que en estos materiales las reacciones de electrodo no se producen sólo en los puntos de contacto triple electrolito-electrodo-gas, sino que se extienden a toda la interfaz electrodo-gas. En el caso de tener una temperatura de operación intermedia es posible preparar electrodos de alta área específica, aumentando aún más los puntos de reacción y mejorando la eficiencia.

**D111**

**CORROSIÓN BAJO TENSIÓN DE LATÓN -  $\alpha$   
EN SOLUCIONES DE  $\text{NaNO}_2$**

**M.Graciela ALVAREZ, Patricia LAPITZ, Silvia A. FERNANDEZ y José  
R. GALVELE.**

**Comisión Nacional de Energía Atómica, CAC, Dpto. Materiales,  
Avda. Gral. Paz 1499, 1650 San Martín, Prov. de Buenos Aires.**

**E-mail: [gralyar@cenqa.edu.ar](mailto:gralyar@cenqa.edu.ar)**

Se estudió el efecto de diferentes variables sobre la susceptibilidad a corrosión bajo tensión y la velocidad de propagación de fisuras de latón -  $\alpha$  en soluciones de  $\text{NaNO}_2$  1M. Las variables estudiadas fueron: pH de la solución (10-12), contenido de cobre de la aleación y potencial de electrodo. Se ensayaron aleaciones de la siguiente composición nominal (% en peso): 63Cu-37Zn, 70Cu-30Zn, 80Cu-20Zn, 90Cu-10Zn, Cu puro (99,99%). La susceptibilidad a corrosión bajo tensión se estudió mediante ensayos de tracción a velocidad de deformación y potencial constante, y la posterior observación de la superficie de fractura por microscopía electrónica de barrido. En el medio corrosivo estudiado todas las aleaciones presentan un potencial de ruptura de la pasividad cuyo valor, a pH constante, aumenta con el contenido de cobre de la aleación. Los resultados obtenidos mostraron que la susceptibilidad a corrosión bajo tensión de los latones  $\alpha$  y el cobre puro está estrechamente relacionada con el proceso de ruptura de la pasividad, pues sólo se observan fisuras de corrosión bajo tensión para valores de potencial más altos que el potencial de picado y en aquellas zonas de la superficie metálica en la que se ha producido la ruptura de la pasividad. Asimismo, se verificó que la velocidad de propagación de las fisuras de corrosión bajo tensión aumenta con el contenido de metal menos noble en la aleación.

**D112**

**Características electroquímicas de una pila de combustión**

**J.R.Casanova<sup>1</sup>, H.J.Fasoli<sup>2</sup>, J.I.Franco<sup>1,2</sup>, A.Sanguinetti<sup>2</sup>**

**(<sup>1</sup>)CINSO, CITEFA-CONICET.**

**J.B. de la Salle 4397, V. Martelli, Bs. As., Argentina.**

**(<sup>2</sup>) Escuela Superior Técnica "Gr1 Manuel N Savio", Cabildo 15, Bs.As., Argentina**

**E-mail: jcasanova@citefa.gov.ar, jfranco@citefa.gov.ar, hfasoli@iese.edu.ar**

Una pila de combustión que utiliza hidrógeno como combustible y oxígeno proveniente del aire como comburente y emplea una membrana de NAFION en su forma ácida como electrolito sólido ha sido desarrollada recientemente en nuestros laboratorios.

A temperatura ambiente y presiones de hidrógeno de una atmósfera, se investigaron sus propiedades electroquímicas utilizando voltametría cíclica y espectroscopía de impedancia electroquímica. Los resultados son comparados entre sí y con resultados similares obtenidos con una pila comercial de parecidas características. Los datos experimentales permiten reconocer los procesos que ocurren en los electrodos y en el electrolito.

**D 113**

**INTERACCIÓN DE FLUNITRAZEPAM CON  
MONOCAPAS DE FOSFOLÍPIDOS ADSORBIDAS EN UNA  
INTERFASE LÍQUIDO/LÍQUIDO.**

**L.M.A. Monzón, L.M. Yudi.**

**INFIQC. Dpto de Fisicoquímica, Fac. de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de  
Córdoba, (C.P. 5000) Córdoba, Argentina.**

**E – mail: mjudi@mail.fcq.unc.edu.ar**

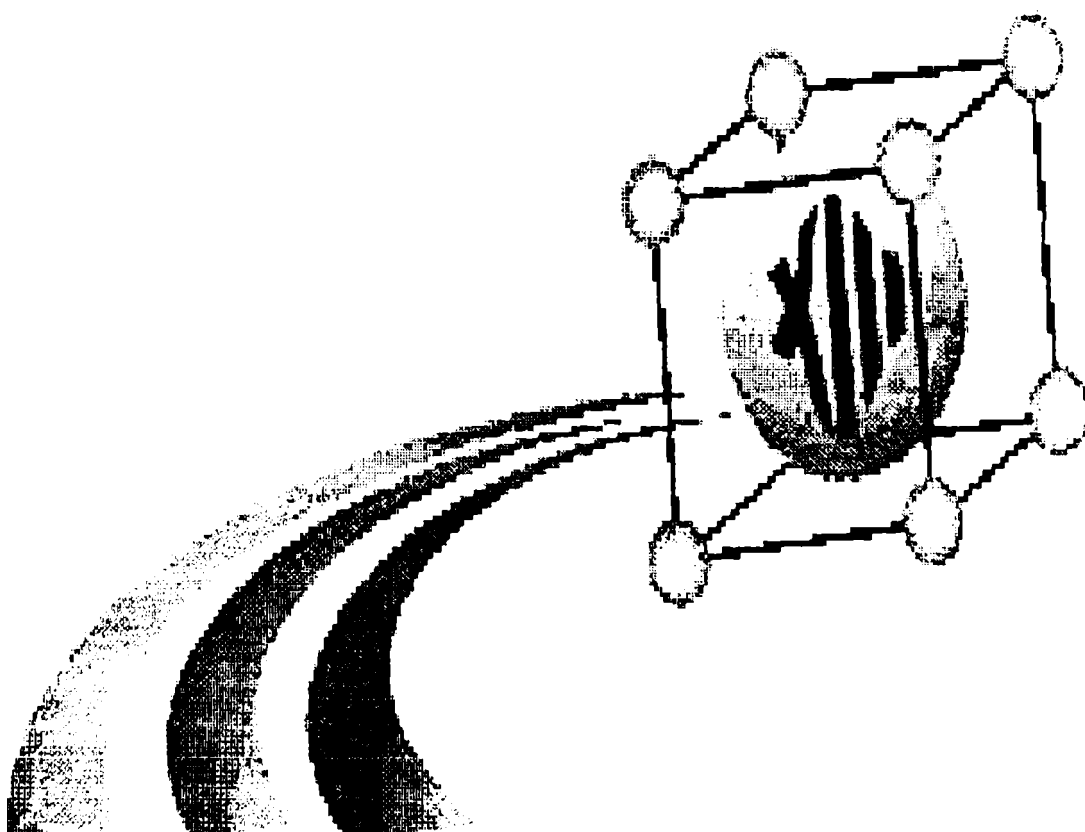
Las Benzodiazepinas son drogas ampliamente utilizadas por sus efectos ansiolíticos, miorelajantes, anticonvulsionantes e hipnóticos. Estos efectos se correlacionan con la capacidad de unión a sitios específicos de proteínas de membrana. Las benzodiazepinas también pueden interaccionar no específicamente con la parte lipídica de las membranas y de esta manera, ejercer efectos laterales tales como modificación de conductancias iónicas, antagonización de canales dependientes de  $Ca^{2+}$ , entre otros.

En este trabajo se estudia la interacción de flunitrazepam con monocapas de fosfolípidos que presentan diferente grupo polar, en presencia de distintos cationes alcalinos y alcalino-térreos en la fase acuosa a diferentes valores de pH. Se caracterizan los cambios que ocurren en los empaquetamientos de las monocapas a través de los cambios en los valores de capacidad de la doble capa y resistencia de transferencia de carga bajo las diferentes condiciones experimentales.

Por otro lado, es conocido que flunitrazepam actúa como un sustituyente de colesterol en membranas. En este trabajo se estudia, además, la modificación del empaquetamiento de las distintas monocapas en presencia de colesterol y su exclusión de las mismas cuando flunitrazepam está presente.

*SECCIÓN E*

*TERMODINÁMICA Y  
FENÓMENOS D E  
TRANSPORTE*



**XIII Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y Química Inorgánica.  
7 al 10 de Abril – 2003 - Bahía Blanca - Argentina**



## SECCIÓN E

| Sección y Numero | TITULO   | AUTORES  | Modalidad |
|------------------|--|--|-----------|
| E1               | COEFICIENTES DE EXPANSIÓN TÉRMICA Y VOLÚMENES DE EXCESO DEL SISTEMA BINARIO METANOL + 1-NONANOL                                  | L. Mussari <sup>1</sup> , S. Canzonieri <sup>1</sup> , A. Camacho <sup>1</sup> , M. Amusátegui <sup>1</sup> , L. Romani <sup>2</sup> , M. Postigo <sup>1,*</sup> | Poster    |
| E2               | VOLUMEN MOLAR DE EXCESO Y VISCOSIDAD DEL SISTEMA TERNARIO AGUA + ÁCIDO PROPIÓNICO + AGUA PESADA A 25 °C                          | A. Mariano <sup>1</sup> , S. Canzonieri, M. Orozco, C. Moreno y M. Postigo**   | Poster    |
| E3               | ANÁLISIS TERMODINÁMICO DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO EN REACCIONES DE ESTERIFICACIÓN   | Beatriz A. Mandagarán y Enrique A. Campanella  | Poster    |
| E4               | REMOCION DE ARSENICO DE AGUAS CON MEMBRANAS DE NANOFILTRACION  | H. Saitúa, M. Campderrós, A. Perez Padilla   | Poster    |
| E5               | ARTICULANDO LAS INFERENCIAS DINÁMICAS CON LA EXPLORACIÓN DE LA SUPERFICIE DE ENERGÍA POTENCIAL EN UN SISTEMA FORMADOR DE VIDRIOS | G.A. Appignanesi (1,2)(*), M.A. Frechero (1), S.Vega (1) y R.A. Montani (1) (**)   | Poster    |
| E6               | TRANSPORTE DE METANOL, PROTONES Y CARGA EN CELDAS DE COMBUSTIBLE DE METANOL DIRECTO  | Elizabeth Bagnato <sup>1</sup> , Graciela Abuin <sup>2</sup> y Horacio Corti <sup>1</sup>  | Poster    |
| E7               | USO DE CAMPOS ELÉCTRICOS EN EL BARRIDO FÍSICO DE MEMBRANAS INORGÁNICAS.  | C. Tarazaga, M. Campderrós, A. Rivarola, J. Rodriguez y A. Pérez Padilla   | Poster    |
| E8               | PARAMETROS EOS DE MEZCLA: ANALISIS MEDIANTE EL USO DE PROPIEDADES MOLARES PARCIALES  | A.C. Chialvo   | Poster    |
| E9               | CORRELACIÓN DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO-LÍQUIDO-VAPOR EN SISTEMAS AZEOTRÓPICOS  | Beatriz A. Mandagarán y Enrique A. Campanella  | Poster    |
| E10              | MOVILIDAD DE SOLUTOS IONICOS Y NO-IONICOS EN   | Guillermo Frank <sup>1</sup> , M. Paula Longinotti <sup>2</sup> ,  | Poster    |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
|     | SOLUCIONES ACUOSAS<br>SOBREENFRIADAS  | Mario Marconi <sup>1</sup> y<br>Horacio Corti <sup>2</sup>   |        |
| E11 | ANOMALÍAS EN EL<br>COMPORTAMIENTO FICKIANO DE LA<br>DIFUSIÓN DE AGUA EN POLÍMEROS<br>HÍBRIDOS ACRILICO/POLIURETÁNICOS                                 | G.A. Guzmán, J.H.<br>Asumendi, N.B. Alvarez,<br>O.R. Pardini, C.I. Elsner, J.I.<br>Amalvy y A.R. Di Sarli  | Poster |
| E12 | EVOLUCIÓN TEMPORAL DE<br>CLUSTERS DE PARTÍCULAS<br>MÓVILES EN UN VIDRIO DE<br>LENNARD-JONES   | G. A. Appignanesi<br>(1,2)(*), M.A. Frechero<br>(1), S. Vega (1) y R.A.<br>Montani (1) (**)  | Poster |
| E13 | Equilibrio ENTRE Fases EN<br>PROCESOS DE Hidrogenación<br>Supercrítica  | L. J. Rovetto <sup>1</sup> , S. B.<br>Bottini <sup>1</sup> , E. A. Brignole <sup>1</sup><br>and C. J. Peters <sup>2</sup>  | Poster |
| E14 | MATERIALES NATURALES PARA<br>EL TRATAMIENTO DE AGUAS:<br>MODELADO DE LA INTERACCIÓN<br>DE Cd, Zn y Co en COLUMNAS DE<br>HIDROXIAPATITA y CALCITA      | Paula SANCHEZ <sup>1</sup> y<br>Daniel CICERONE <sup>1,2</sup>   | Poster |
| E15 | ESTABILIDAD Y PROPIEDADES<br>REOLÓGICAS DE<br>MEZCLAS DE POLIETILENO Y<br>POLIPROPILENO   | Jorge A. Rodríguez Fris,<br>Marcelo D. Failla y<br>Lidia M. Quinzani   | Poster |
| E16 | EL METODO NRTL Y SU<br>APLICACIÓN EN<br>EQUILIBRIOS DE FASE EN<br>SISTEMAS TERNARIOS  | Carmen R.<br>BARRERO <sup>1</sup> , Jorge<br>ALVAREZ JULIA <sup>2</sup> , M.<br>Eugenia CORSO <sup>1</sup> ,   | Poster |
| E17 | ENTALPIAS EXPERIMENTALES<br>DE MEZCLAS BINARIAS<br>COTENIENDO<br>HIDROFLUORETERES + ALCANOS<br>A 298.15 K Y 101.3 kPa.                                | M.E.F. de Ruiz<br>Holgado <sup>1</sup> , Marta M.<br>Mato <sup>2</sup> , Manuel<br>M. Piñero <sup>3</sup> , Eleuterio L.<br>Arancibia <sup>1</sup> , Jose<br>L. Legido <sup>3</sup> y M.I. Paz<br>Andrade <sup>2</sup> . | Poster |
| E18 | VOLUMENES, VISCOSIDADES E<br>INDICES DE REFRACCION<br>DE MEZCLAS DE ISO-OCTANO +<br>ALCOHOL ISO-AMILICO<br>A TRES TEMPERATURAS                        | J. A. SALAS, J. L.<br>ZURITA AND M.<br>KATZ  | Poster |
| E19 | PREDICCIÓN DE VISCOSIDADES<br>CON EL MODELO UNIMOD-GC EN<br>SISTEMAS CONSTITUIDOS POR<br>ALCOHOLES CON DERIVADOS<br>METILADOS DE<br>POLIETILENGLICOL. | S. Aznarez <sup>2</sup> , J.A. Amid,<br>M.M.E. de Ruiz<br>Holgado <sup>1</sup> , y<br>E. L. Arancibia <sup>1</sup>   | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| E20 | ELECTRÓNICA MOLECULAR:<br>CONDUCTANCIA DE CAPAS<br>MONOMOLECULARES                              | A. Lempel, G. Gordillo,<br>E.J. Calvo  | Poster |
| E21 | MODELADO DE COEFICIENTES<br>DE ACTIVIDAD EN SOLUCIONES<br>QUE PRESENTAN ASOCIACION<br>MOLECULAR | O.M. Ferreira <sup>1</sup> , G.M.<br>Foco <sup>2</sup> , E.A. Brignole <sup>2</sup><br>and S.B. Bottini <sup>2</sup> | Oral   |
| E22 | DIFUSIÓN DE CLORURO EN<br>HORMIGONES ELABORADOS CON<br>DIFERENTES TIPOS DE<br>CEMENTOS          | E.M. Cremona, M.R.<br>Barbosa  | Oral   |
| E23 | CONTROVERSIA SOBRE LA<br>EXISTENCIA DE FENÓMENO<br>MULTICRÍTICO EN FLUIDOS<br>IÓNICOS           | Karin I. Gutkowski,<br>Hugo L. Bianchi and M.<br>Laura Japas   | Oral   |
| E24 | ASOCIACIÓN IÓNICA DE $\text{CuSO}_4$<br>ACUOSO:<br>EFECTO DE LA TEMPERATURA                     | Lucila MENDEZ DE<br>LEO <sup>1,3</sup> , Roberto<br>FERNANDEZ PRINI <sup>1,2</sup><br>y Hugo BIANCHI <sup>1,3</sup>  | Oral   |

E 1

**COEFICIENTES DE EXPANSIÓN TÉRMICA Y  
VOLÚMENES DE EXCESO DEL SISTEMA  
BINARIO METANOL + 1-NONANOL**

**L. Mussari<sup>1</sup>, S. Canzonieri<sup>1</sup>, A. Camacho<sup>1</sup>, M. Amusátegui<sup>1</sup>, L. Romani<sup>2</sup>,  
M. Postigo<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup> **Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue.**

**Buenos Aires 1400, 8300, Neuquén. \*Investigador del CONICET.**

<sup>2</sup> **Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Campus de Orense,  
Universidad de Vigo, 32004 Orense, España.**

**E-mail: [postigo@uncoma.edu.ar](mailto:postigo@uncoma.edu.ar)**

El propósito de este trabajo es estudiar el efecto de la temperatura sobre el volumen molar del sistema binario Metanol +1-Nonanol y determinar los coeficientes de expansión térmica del sistema. Se midieron densidades a 15, 20, 25, 30, 35 y 40 °C de las sustancias puras y sus mezclas a composiciones seleccionadas en todo el rango de fracciones molares, con un densímetro de tubo vibrante Anton-Paar DSA-48, automáticamente termostalizado a  $\pm 0.01$  K, con un error estimado de  $\pm 0.01$  Kg m<sup>-3</sup>. Las mezclas se prepararon por pesada y las fracciones molares se obtuvieron por cálculo directo con un error de  $\pm 1 \cdot 10^{-4}$ . A partir de los datos de densidad, concentración y temperatura se calculan los volúmenes molares, los coeficientes de expansión térmica y las correspondientes propiedades de exceso. Se ajustan estas propiedades al modelo de Redlich-Kister y se encuentra la funcionalidad de los coeficientes del modelo con la temperatura. El volumen molar de exceso se correlaciona con el modelo de Flory. Se analizan los resultados en función de los cambios estructurales e interacciones de las mezclas.

E 2

**VOLUMEN MOLAR DE EXCESO Y VISCOSIDAD  
DEL SISTEMA TERNARIO AGUA + ÁCIDO  
PROPIÓNICO + AGUA PESADA A 25 °C**

**A. Mariano<sup>\*</sup>, S. Canzonieri, M. Orozco, C. Moreno y M. Postigo<sup>\*\*</sup>**

**Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400  
(8300) Neuquén**

**E-mail: [postigo@uncoma.edu.ar](mailto:postigo@uncoma.edu.ar), <sup>\*</sup>Becaria de CONICET, <sup>\*\*</sup>Investigador de  
CONICET**

En este trabajo se midieron densidades y viscosidades del sistema ternario Agua (H<sub>2</sub>O) + Ácido Propiónico + Agua Pesada (D<sub>2</sub>O) a presión atmosférica y 25 °C. Las densidades se midieron con un densímetro digital de tubo vibrante Mettler DA-310, con un error de 0,01 Kg.m<sup>-3</sup>. Las viscosidades se determinaron con viscosímetros Cannon-Fenske previamente calibrados, de capilar recomendado para el rango de viscosidad de trabajo, midiendo el tiempo de escurrimiento con un error de 0,1 s; el error en la viscosidad se estima en 0,005 mPa.s.

A partir de la información experimental obtenida se calcularon, el volumen molar de exceso,  $V^E$ , la desviación de la viscosidad,  $\Delta\eta$  y la energía libre de exceso de activación por flujo viscoso,  $\Delta G^{*E}$ . Como se trabajó con una concentración de D<sub>2</sub>O 85 % molar (15 % H<sub>2</sub>O), se utilizaron modelos geométricos disponibles en la literatura para estimar el volumen molar de exceso y la desviación de la viscosidad del sistema binario Ácido Propiónico + D<sub>2</sub>O.

Los valores de  $V^E$ ,  $\Delta\eta$  y  $\Delta G^{*E}$ , fueron ajustados con las ecuaciones polinómicas de Cibulka, Nagata y Singh.

En este sistema ternario los volúmenes molares de exceso son negativos y la desviación de la viscosidad positiva.

**E 3**

**ANÁLISIS TERMODINÁMICO DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO EN REACCIONES DE ESTERIFICACIÓN**

**Beatriz A. Mandagarán y Enrique A. Campanella**

**INTEC(CONICET-UNL), Güemes 3450, 3000 Santa Fe**

**tquique@ceride.gov.ar**

La destilación reactiva se presenta como un proceso alternativo para conducir simultáneamente reacción química en la fase líquida con separación líquido-vapor. En la destilación reactiva la información del equilibrio químico es importante ya que decide la topología del diagrama de fases, y en consecuencia la distribución y pureza de los productos ha obtener. La estimación de la constante de equilibrio con una combinación de datos termoquímicos y una ecuación de estado puede representar una alternativa a los experimentos en la etapa de diseño conceptual del proceso de destilación reactiva. Este trabajo calcula y compara constantes de equilibrio para distintas reacciones de esterificación. Las constantes de equilibrio fueron calculadas como constantes en la fase gas con datos termoquímicos de la literatura, y luego corregidas con coeficientes de fugacidad y presiones de vapor. Los cálculos de los coeficientes de fugacidad fueron realizados con un modelo de ecuación de virial que tiene en cuenta la asociación entre los componentes de la mezcla. Cuando fue necesario, las constantes de equilibrio experimentales fueron corregidas, para comparar con las gaseosas, con un modelo de coeficientes de actividad (Wilson, NRTL o UNIQUAC); en el caso que la información experimental para obtener los parámetros binarios de los modelos no estaba disponible en la literatura se utilizaron parámetros estimados por UNIFAC. El trabajo presenta resultados para treinta reacciones de esterificación. El acuerdo entre cálculos y experimentos es razonable. La variación de la constante de equilibrio calculada con la temperatura es pequeña como es de esperar para la mayoría de las reacciones de esterificación. El trabajo discute, también, la posibilidad de corregir la información de las energías libre de formación de los datos termoquímicos para el caso que la diferencia entre las constantes calculadas y las experimentales sea muy grande.

**E 4**

**REMOCION DE ARSENICO DE AGUAS CON MEMBRANAS DE NANOFILTRACION**

**H. Saitúa, M. Campderrós, A. Perez Padilla**

**Facultad de Qca, Bioquímica y Farmacia - INTEQUI-UNSL**

**Chacabuco 915- 5700 San Luis- Argentina**

**E-mail: apadilla@unsl.edu.ar**

Los severos efectos producidos por los altos contenidos de As en aguas destinadas al consumo humano han generado la necesidad de disminuir los máximos niveles permitidos vigentes (50 ppb), incentivando el desarrollo de varias tecnologías. La ósmosis inversa ha sido identificada como la tecnología más adecuada para la remoción de As, pero los estudios económicos han demostrado su alto costo. El desarrollo de nuevas membranas de nanofiltración (NF) con alta selectividad y permeabilidad a bajas presiones de operación sumadas a su efectividad para remover iones divalentes ha despertado un reciente interés en examinar su eficiencia para eliminar As ya que éste se encuentra en las aguas naturales como  $\text{HAsO}_4^{3-}$ .

En este trabajo se utilizó un módulo de membrana a escala piloto provisto por Osmonic conteniendo una membrana comercial espiralada NF 300 de poliamida, la cual fue caracterizada por medidas de permeabilidad hidráulica. Se operó con un sistema batch a una temperatura de 25°C y una presión de alimentación de 500 KPa. Se estudiaron muestras de agua sintética con diferentes concentraciones de As en presencia de  $\text{NaHCO}_3$   $10^{-3}\text{M}$  para simular la alcalinidad y el pH de las aguas naturales. Los análisis As fueron realizados por espectrometría de absorción atómica de plasma inductivamente acoplado (ICP-AES con Generación de Hidruros).

La remoción de As fue de aproximadamente un 90% a partir de muestras sintéticas conteniendo 50, 100 y 300 ppb de As (V), resultando en concentraciones de As en el permeado de 6, 11 y 25 ppb respectivamente, con elevado rendimiento de agua recuperada. En general el rechazo de As aumentó con el incremento de As en la corriente de alimentación.

E 5

## ARTICULANDO LAS INFERENCIAS DINÁMICAS CON LA EXPLORACIÓN DE LA SUPERFICIE DE ENERGÍA POTENCIAL EN UN SISTEMA FORMADOR DE VIDRIOS

**G.A.Appignanesi (1,2)(\*)**, M.A. Frechero (1), S.Vega (1) y R.A. Montani (1) (\*\*)  
(1) Departamento de Química; (2) Instituto de Matemática (INMABB-UNS-CONICET), Universidad Nacional de Sur, (8000) Bahía Blanca, Argentina  
(\*) CONICET ; (\*\*) CIC  
[appignan@criba.edu.ar](mailto:appignan@criba.edu.ar)

Desde una perspectiva teórica, el estudio de la dinámica de relajación de sistemas vítreos ha sido abordado principalmente por dos avenidas: La implementación de simulaciones de dinámica molecular y el análisis de la exploración "topográfica" que el sistema realiza de su superficie de energía potencial. Si bien ambos enfoques (que puntualizan distintas manifestaciones de la dinámica) resultan altamente complementarios, hasta el presente han permanecido divorciados. En este trabajo intentamos vincular ambos enfoques. A tal fin, y por medio de simulaciones de dinámica molecular, caracterizamos las inhomogeneidades locales que ocurren en un sistema de Lennard-Jones binario subenfriado. Las trayectorias así obtenidas son "quenchedas" de modo de correlacionar dichas trayectorias "reales" con las correspondiente trayectorias descriptas sobre la superficie de potencial (caracterizando además las correspondientes "estructuras inherentes"). De tal modo intentamos mostrar que los movimientos correlacionados de partículas (organizados en "strings") resultan ser los eventos responsables de los saltos relevantes en la superficie de potencial. En particular, nos interesa comprobar la hipótesis de que los eventos de iniciación de los strings determinan la consiguiente exploración "topográfica".

E 6

## TRANSPORTE DE METANOL, PROTONES Y CARGA EN CELDAS DE COMBUSTIBLE DE METANOL DIRECTO

**Elizabeth Bagnato<sup>1</sup>, Graciela Abuin<sup>2</sup> y Horacio Corti<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Unidad de Actividad Química, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. General Paz 1499, (1650) San Martín, Buenos Aires.

<sup>2</sup>Instituto Nacional de Tecnología Industrial, Av. General Paz 1599, (1650) San Martín, Buenos Aires, e-mail: [bagnato@cncea.gov.ar](mailto:bagnato@cncea.gov.ar)

En este trabajo se analizan fenómenos de transporte de interés para la elección y optimización de materiales de celdas de combustible DMPEM en el ámbito de presión y temperatura de interés en la operación real. El primer componente analizado es la membrana de intercambio de protones. Se compara la conductividad eléctrica de las membranas Nafion (polifluoroestirensulfonatos) utilizadas en celdas PEM convencionales con membranas de PBI (polibenzimidazol) modificadas con ácido fosfórico. Se determinó también el coeficiente de permeabilidad de metanol en la membrana para diversos contenidos de agua a temperaturas hasta 150°C y presiones adecuadas para mantener la mezcla en estado líquido. Se determinó el coeficiente de arrastre (*drag factor*) de metanol en condiciones de transporte de carga en las membranas. Esta información permite modelar el comportamiento de la membrana en condiciones de operación. El segundo componente analizado es el electrocatalizador de Pt-Ru soportado sobre carbón (Vulcan XC72R). Se describen procedimientos de síntesis que llevan a la generación de material nanoparticulado y se muestran resultados preliminares de la corriente de electrooxidación de metanol a alta temperatura utilizando una celda de flujo desarrollada en el grupo que permite reproducir condiciones similares a la de operación de la celda de combustible.

E 7

## USO DE CAMPOS ELÉCTRICOS EN EL BARRIDO FÍSICO DE MEMBRANAS INORGÁNICAS.

C. Tarazaga, M. Campderrós, A. Rivarola, J. Rodriguez  
y A. Pérez Padilla

Facultad de Qca, Bioquímica y Farmacia - INTEQUI-UNSL

Chacabuco 915- 5700 San Luis- Argentina

E-mail: apadilla@unsl.edu.ar

Una de las mayores limitaciones para el cambio de escala industrial de los procesos biotecnológicos son las dificultades encontradas en los procesos de separación de las suspensiones biológicas. La filtración de flujo cruzado es una técnica promisoría para la separación, concentración y fraccionamiento de bioproductos. A pesar de las ventajas en el uso de la ultrafiltración (UF) a gran escala el proceso está limitado por los problemas de polarización por concentración, ensuciamiento y decaimiento del flujo. Por lo tanto se han puesto muchos esfuerzos para desarrollar estrategias de limpieza de las membranas. En este trabajo se aplican campos eléctricos para disminuir el ensuciamiento durante la UF de sero albúmina bovina (BSA). Se investiga la influencia de la fuerza de campo eléctrico aplicado y la concentración de proteína en la solución.

La solución de alimentación es termostaticada y alimentada al módulo de UF mediante una bomba peristáltica, provista de sensores de presión. La membrana inorgánica empleada es de  $ZrO_2-Ti-O_2$  con soporte de carbón (Carbosep<sup>®</sup>) con un corte de peso molecular de 50000 dalton. El campo eléctrico se aplica mediante un generador de alterna CRC cuya salida se rectifica a media onda antes de ser aplicada. La membrana se emplea como cátodo y un alambre central de acero inoxidable funciona como ánodo. Las partículas en suspensiones biológicas tienen una carga uniforme, la BSA está cargada negativamente a valores de  $pH > 5$ .

E 8

## PARAMETROS EOS DE MEZCLA: ANALISIS MEDIANTE EL USO DE PROPIEDADES MOLARES PARCIALES

A.C. Chialvo

Programa de Electroquímica Aplicada e Ingeniería Electroquímica (PRELINE)

Facultad de Ingeniería Química (UNL)

Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe (Argentina)

E-mail: achialvo@fiqus.unl.edu.ar

Para describir la dependencia de los parámetros ( $p$ ) de las ecuaciones de estado (EOS) con la composición se recurre usualmente a las denominadas reglas de mezcla, las cuales involucran parámetros de interacción binaria ( $p_{ij}$ ). Por otra parte, para la descripción de éstos parámetros de interacción binarios se define las denominadas reglas de combinación. Un rápido repaso de bibliografía permite observar la existencia de una gran variedad de propuestas, generalmente orientadas a mejorar la capacidad descriptiva de una dada EOS para un determinado tipo de componentes (polares, etc).

Si bien la utilización de las propiedades molares parciales para describir la dependencia con la composición de los parámetros de las EOS ha sido propuesta con anterioridad, no se ha avanzado sobre el tema. En este contexto, el presente trabajo desarrolla la aplicación del formalismo de las propiedades molares parciales orientada a la descripción de los parámetros EOS para mezclas de fluidos. Para ello se definió el parámetro de mezcla ( $p_m$ ), el cual al ser aplicado a las reglas de mezcla conocidas permitió un análisis ordenado de las mismas. De este modo, se evaluó la capacidad descriptiva intrínseca de cada una de ellas, encontrándose que varias reglas propuestas son en realidad equivalentes. Finalmente, se analizaron dependencias experimentales de los parámetros EOS de mezcla y se los correlacionó a través del uso de dicho parámetro.

E 9

**CORRELACIÓN DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO-LÍQUIDO-VAPOR EN SISTEMAS AZEOTRÓPICOS**

**Beatriz A. Mandagarán y Enrique A. Campanella**  
**INTEC(CONICET-UNL), Güemes 3450, 3000 Santa Fe**

[equilibr@conicet.gov.ar](mailto:equilibr@conicet.gov.ar)

El sistema típico para el proceso de destilación azeotrópica heterogénea presenta tres azeótropos binarios, un azeótropo ternario, dos de los cuales son heterogéneos y una zona de equilibrio líquido-líquido con un solo par inmiscible. En este trabajo se han estudiado quince sistemas, algunos de cuales presentan variaciones del sistema típico, ya sea en el número de azeótropos o en el número de pares inmiscibles. En el trabajo se discute el resultado de correlacionar los datos de equilibrio líquido-líquido-vapor y equilibrio líquido-líquido de esos sistemas dentro del contexto de la destilación azeotrópica heterogénea. Como los datos de equilibrio líquido-líquido-vapor son difíciles de medir, los datos son examinados con un test de consistencia termodinámica. El examen de consistencia utilizado para los datos de equilibrio líquido-líquido-vapor se basa en la ecuación de Hand. En el trabajo se comparan distintas alternativas de correlación: utilización de datos binarios, utilización de datos ternarios líquido-líquido-vapor y utilización de datos ternarios líquido-líquido. Cada una de esas alternativas de correlación responde al uso que se va a hacer de la correlación resultante en la simulación del esquema torre de separación más decantador: un solo conjunto de parámetros para todo el esquema, o un conjunto de parámetros para la torre de destilación y otro conjunto diferente para el decantador. La alternativa que utiliza solamente datos binarios es una alternativa predictiva para los equilibrios ternarios. En este caso la predicción de la composición de la fase vapor muestra errores grandes, pero la predicción del comportamiento de las dos fases líquidas y de todos los azeótropos del sistema es adecuada. Las otras alternativas de correlación presentan un menor error en los datos que correlacionan y un error mayor en el cálculo de los otros datos.

E 10

**MOVILIDAD DE SOLUTOS IONICOS Y NO-IONICOS EN SOLUCIONES ACUOSAS SOBREENFRIADAS**

**Guillermo Frank<sup>1</sup>, M.Paula Longinotti<sup>2</sup>, Mario Marconi<sup>1</sup> y Horacio Corti<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UBA),  
 Pabellón I, Ciudad Universitaria, (1428) Buenos Aires.

<sup>2</sup>Unidad de Actividad Química, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. General  
 Paz 1499, (1650) San Martín, Buenos Aires.

e-mail: [hrcorti@cnea.gov.ar](mailto:hrcorti@cnea.gov.ar)

En este trabajo se determinó experimentalmente el coeficiente de difusión de fluoresceína y solutos iónicos en soluciones acuosas sobreenfriadas de sacarosa y trehalosa en función de la temperatura y la concentración de disacárido. Las técnicas empleadas fueron FRAP (*fluorescence recovery after photobleaching*) y difusión lineal semi-infinita en el caso de la fluoresceína y voltametría con microelectrodos en el caso de solutos iónicos electroactivos como los iones ferri y ferrocianuro.

El ámbito de temperaturas y concentraciones estudiado abarca varios órdenes de magnitud en viscosidad y se aproxima a la curva de transición de fase del sistema binario disacárido-agua donde la viscosidad de estos líquidos frágiles aumenta en forma notable.

Estos resultados, junto con los obtenidos anteriormente para la conductividad eléctrica de una serie de iones simples y complejos (NaCl,  $MgCl_2$ , borato), permiten analizar la validez de los modelos de fricción viscosa en estos sistemas metaestables. Se compara la dependencia de los coeficientes de transporte con la viscosidad y se analiza una expresión semiempírica que permite extender el modelo hidrodinámico clásico en la región sobreenfriada. La interpretación microscópica de los resultados sugiere la presencia de heterogeneidades locales que afectan de manera distinta a los solutos dependiendo de su carga, tamaño e interacción específica con el solvente.

E 11

**ANOMALÍAS EN EL COMPORTAMIENTO FICKIANO DE LA  
DIFUSIÓN DE AGUA EN POLÍMEROS HÍBRIDOS  
ACRILICO/POLIURETÁNICOS**

**G.A. Guzmán, J.H. Asurmendi, N.B. Alvarez, O.R. Pardini, C.I. Elsner, J.I. Amalvy y A.R. Di Sarli**  
**CIDEPINT, Centro de Investigación y Desarrollo en Tecnología de Pinturas**  
**Av. 52 entre 121 y 122, B1900AYB La Plata**  
**E-mail: anelpire@cidepint.gov.ar, cielsner@volta.ing.unlp.edu.ar**

Las regulaciones ecológicas tendientes a disminuir la emisión de compuestos orgánicos volátiles generados por la industria de la pintura han conducido al desarrollo de nuevos materiales amigables con el medio ambiente. En el caso en que las pinturas tengan por finalidad proteger un sustrato metálico contra la corrosión, resulta de suma importancia evaluar los mecanismos y cinética de los procesos que gobiernan el transporte de agua, causal fundamental de la degradación del sistema de protección. Con este objetivo, y como una primer etapa de un estudio sistemático más amplio destinado a caracterizar mediante técnicas electroquímicas de CA diversos materiales en condiciones de servicio, en el presente trabajo se evalúa la permeabilidad al agua de películas poliméricas híbridas 10/90 acrílico-poliuretánicas aplicadas sobre sustratos de acero y luego expuestas a una solución 0.05M NaCl. Todas las películas estudiadas fueron de tipo multicapa, con un tiempo de secado entre capa y capa de 1h a 30°C y un curado final de 24h a 30°C más otras 24h a 80°C. Los espesores finales ensayados variaron entre 30 y 250µm.

Los resultados obtenidos permiten inferir que la difusión del agua a través de estos materiales presenta un comportamiento no Fickiano traducido en que el coeficiente de permeabilidad crece con el espesor de película.

E 12

**EVOLUCIÓN TEMPORAL DE CLUSTERS DE PARTÍCULAS  
MÓVILES EN UN VIDRIO DE LENNARD-JONES**

**G.A. Appignanesi (1,2)(\*), M.A. Frechero (1), S. Vega (1) y R.A. Montani (1) (\*\*)**  
**(1) Departamento de Química; (2) Instituto de Matemática (INMABB-UNS-  
CONICET), Universidad Nacional de Sur, (8000) Bahía Blanca, Argentina**  
**(\*) CONICET ; (\*\*) CIC**  
**appignan@criba.edu.ar**

Por medio de simulaciones de dinámica molecular estudiamos en forma detallada la evolución temporal de los movimientos cooperativos en sistemas de Lennard-Jones binarios a temperaturas cercanas a  $T_c$ , la temperatura de "mode coupling". Encontramos que las partículas móviles se organizan en clusters y que se mueven de manera altamente correlacionada y concertada en forma de cadenas ("strings"). Dichos strings son caracterizados tanto geométrica como dinámicamente. A bajas temperaturas cada string ocurre en una estrecha ventana de tiempo dentro del intervalo  $[0, t^*]$ , donde  $t^*$  es un tiempo característico de este sistema relacionado con el tiempo de vida media de los clusters globales de partículas móviles. Más aún, demostramos que los diferentes strings que componen un dado cluster global ocurren de manera independiente y asincrónica, consistentemente con un escenario de tipo heterogéneo de la relajación (responsable de la ocurrencia de una ley de relajación de tipo exponencial extendida o de Kohlrausch) pero en cual las diferentes subregiones se relajan a tiempos distintos. Finalmente, demostramos también que a medida que la temperatura se incrementa, los distintos strings evolucionan durante una fracción creciente del intervalo de tiempo  $[0, t^*]$  y que a cierta temperatura los tiempos de vida media de los strings y de los clusters globales de partículas móviles resultan comparables.

E 13

### EQUILIBRIO ENTRE FASES EN PROCESOS DE HIDROGENACIÓN SUPERCRÍTICA

L. J. Rovetto<sup>1</sup>, S. B. Bottini<sup>1</sup>, E. A. Brignole<sup>1</sup> and C. J. Peters<sup>2</sup>

<sup>1</sup> PLAPIQUI, Universidad Nacional del Sur-CONICET, 8000 Bahía Blanca, Argentina <sup>2</sup>Delft University of Technology, 2628 BL Delft, The Netherlands.  
E-mail: lrovetto@plapiqui.edu.ar

Los procesos industriales tradicionales de hidrogenación de sustratos líquidos se llevan a cabo en reactores multifásicos en los que el sustrato a hidrogenar se mezcla con un catalizador sólido e hidrógeno gaseoso. El mayor inconveniente que presentan estos procesos es la baja selectividad y velocidad de reacción ocasionadas por la baja solubilidad del H<sub>2</sub> y la alta resistencia a la transferencia de masa en la fase líquida. Investigaciones llevadas a cabo en los últimos años proponen la utilización de procesos alternativos de hidrogenación en los que, mediante el agregado de un solvente supercrítico, se transforma la mezcla reactiva en una fase homogénea, en contacto con el catalizador. De esta forma la reacción deja de ser controlada por difusión y su velocidad se incrementa en varios órdenes de magnitud. El adecuado diseño de estos procesos de hidrogenación supercrítica requiere del conocimiento de las condiciones de equilibrio de fases entre solventes supercríticos y mezclas reactivas, a fin de determinar las condiciones de homogeneidad. En este trabajo se reportan datos experimentales del equilibrio entre fases de mezclas típicas de procesos de hidrogenación de aceites vegetales y ésteres grasos con fluidos supercríticos. Los datos fueron obtenidos midiendo condiciones de saturación de mezclas de composición conocida, en un equipo tipo Cailletet. Se presentan condiciones de equilibrio líquido-vapor y líquido-líquido, en un rango de temperaturas entre 323 y 353 K y presiones de hasta 15 MPa.

E 14

### MATERIALES NATURALES PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS: MODELADO DE LA INTERACCIÓN DE Cd, Zn y Co EN COLUMNAS DE HIDROXIAPATITA y CALCITA

Paula SANCHEZ<sup>1</sup> y Daniel CICERONE<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Escuela de Posgrado, Universidad Nacional de San Martín

<sup>2</sup> Unidad de Actividad Química, CAC, Comisión Nacional de Energía Atómica, Avda. Gral. Paz 1499 (1650) San Martín. E-MAIL: cicerone@cenia.gov.ar

En este trabajo se presenta el modelado de los resultados de transporte de Br, Cd, Zn y Co en columnas de calcita (CaCO<sub>3</sub>) e hidroxiapatita [Ca<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>OH] sintéticas. A partir del mismo se evaluó el efecto de la dureza, salinidad, alcalinidad y pH de los efluentes sobre el proceso de sorción. Para ello se utilizó el algoritmo de cálculo PHREEQC (ver. 2.4, Parkhurst D.L. y Appelo, C.A., 2002) que permite el modelado unidimensional de procesos de transporte de contaminantes en medios porosos. Los resultados de calcita pudieron reproducirse considerando un importante proceso de precipitación de los metales (como carbonatos e hidróxidos) a la entrada de la columna, seguido de intercambio iónico por Ca<sup>2+</sup> a lo largo de la misma. Los resultados de hidroxiapatita fueron satisfactoriamente descriptos considerando un modelo mixto de complejación superficial (sobre los iones fosfato superficiales) e intercambio iónico (en sitios Ca<sup>2+</sup>). Se utilizaron los valores de las constantes de intercambio iónico y complejación superficial hallados previamente (Gómez del Río y colab. 2001). El aumento del pH, la alcalinidad y la salinidad incrementaron la concentración superficial de los metales en calcita e hidroxiapatita, inmovilizando con mayor eficiencia este tipo de contaminantes.

E 15

## ESTABILIDAD Y PROPIEDADES REOLÓGICAS DE MEZCLAS DE POLIETILENO Y POLIPROPILENO

**Jorge A. Rodríguez Fris, Marcelo D. Failla y Lidia M. Quinzani**  
**PLAPIQUI (UNS-CONICET) - C.C. 717 - Bahía Blanca, Argentina**  
**E-mail: [lquinzani@plapiqui.edu.ar](mailto:lquinzani@plapiqui.edu.ar)**

En el presente trabajo se estudian las propiedades viscoelásticas lineales de mezclas de PP/PE y su relación con la composición de las mezclas y la estructura de fases. Para ello se utiliza un PP (*Petroquímica Cuyo*,  $M_w = 450,000$  Da) y un PE (*Petropol*,  $M_w = 55,000$  Da) y se consideran concentraciones de 30, 50 y 70 % en peso de PE. Se estudian, además, mezclas de iguales proporciones preparadas a partir de fracciones de PP y PE previamente modificadas con distintas concentraciones de peróxido (el 2,5-dimetil 2,5-diterbutil peroxihexano), y materiales preparados a partir del mezclado y modificación simultáneos de PP y PE. La morfología de las mezclas es estudiada por microscopía electrónica de barrido observando superficies de fractura obtenidas a temperatura de nitrógeno líquido y tratadas químicamente para generar contraste entre las fases. Las morfologías observadas cubren un espectro de estructuras que van desde una distribución de pequeños dominios dispersos en una matriz, a estructuras co-continuas complejas. Por otro lado, todas las mezclas muestran evidencias de aglomeración de dominios en el tiempo cuando son sometidas a procesos de envejecimiento en fundido, por ejemplo, durante los ensayos reológicos. Este proceso se ve afectado por la historia de deformaciones de la muestra durante el envejecimiento. La caracterización reológica se lleva a cabo midiendo los módulos dinámicos en ensayos de barrido de frecuencia a diversas temperaturas, en atmósfera de nitrógeno, y con diversas secuencias de deformaciones durante el tiempo de envejecimiento. Los resultados reológicos no parecen ser afectados por los cambios morfológicos que las muestras sufren durante el envejecimiento.

E 16

## EL METODO NRTL Y SU APLICACIÓN EN EQUILIBRIOS DE FASE EN SISTEMAS TERNARIOS

**Carmen R. BARRERO<sup>1</sup>, Jorge ALVAREZ JULIA<sup>2</sup>, M. Eugenia CORSO<sup>1</sup>,  
 M. del Carmen GRANDE<sup>1</sup> y Carlos M. MARSCHOFF<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Química, <sup>2</sup>Departamento de Matemática,

<sup>3</sup>Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, U.B.A.

Departamento de Química, Facultad de Ingeniería, U.B.A.

Paseo Colón 850, (1063) Buenos Aires. Tel: 54-11-4343-0891

E-mail: [cbarrer@fi.uba.ar](mailto:cbarrer@fi.uba.ar), [mgrande@fi.uba.ar](mailto:mgrande@fi.uba.ar)

El método NRTL desarrollado originalmente por Renon y Prausnitz (Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures, AIChE Journal, 1968) es uno de los más utilizados para correlacionar datos de equilibrios de fase en sistemas de tres componentes.

En el trabajo original los coeficientes de interacción de moléculas se calcularon a partir de datos experimentales de equilibrios binarios líquido-vapor que involucran a dos de los componentes de la mezcla ternaria, obteniéndose ajustes razonablemente buenos con los datos experimentales.

A medida que la investigación se derivó hacia sistemas ternarios con componentes menos comunes, la carencia de datos de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias hizo que muchos autores recurrieran a métodos computacionales para encontrar los parámetros de interacción.

Esta práctica involucra riesgos importantes, ya que supone una confianza absoluta en la fortaleza del método y la unicidad de soluciones.

En este trabajo se analizan datos obtenidos para varios sistemas ternarios, a partir de los cuales se demuestra que el uso indiscriminado de técnicas computacionales conduce a resultados que carecen de sentido físico y se discuten algunas alternativas a la aplicación del método.

E 17

**ENTALPIAS EXPERIMENTALES DE MEZCLAS BINARIAS  
COTENIENDO HIDROFLUORETERES + ALCANOS A  
298.15 K Y 101.3 kPa.**

M.E.F. de Ruiz Holgado<sup>1</sup>, Marta M. Mato<sup>2</sup>, Manuel  
M. Piñero<sup>3</sup>, Eleuterio L. Arancibia<sup>1</sup>, Jose L. Legido<sup>3</sup> y M.I. Paz Andrade<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Química. Facultad de Ciencias Exacta y Tecnología. Universidad Nacional de Tucumán. (4000) San Miguel de Tucumán.

c-mail: earancibia@herrera.unt.edu.ar

<sup>2</sup>Departamento de Física Aplicada. Universidad de Santiago, Santiago de Compostela. España.

<sup>3</sup>Departamento de Física Aplicad. Universidad de Vigo, Vigo, España

La caracterización termofísica de hidrofluoréteres (HFEs) ha centrado la atención en los últimos años por la potencialidad que presentan estos derivados fluorados de ser empleados como fluidos refrigerantes, de reducido impacto ambiental, en aplicaciones industriales. Mezclas con n-alcános de estos fluidos refrigerantes presentan interés desde un punto de vista práctico y desde el punto de vista teórico. es un desafío a los modelos de contribución de grupos empleados para predecir sus propiedades. En este trabajo se presenta valores de entalpías de mezclas de los sistemas formados por nonafluorbutil metil eter + octano y nonafluorbutil etil eter + octano a 298.15 K y 101.3 kPa. Las entalpías molares de exceso fueron determinadas empleando un microcalorímetro estandar Calvet conectado a un voltímetro Philips PM2525 y ellas son positivas en todo el rango de concentración. Los resultados experimentales obtenidos se discuten en término de las interacciones moleculares involucradas y se han contrastado con los métodos de contribución de grupo para analizar las capacidades predictivas de los mismos.

E 18

**VOLUMENES, VISCOSIDADES E INDICES DE  
REFRACCION DE MEZCLAS DE ISO-OCTANO +  
ALCOHOL ISO-AMILICO A TRES TEMPERATURAS**

**J. A. SALAS, J. L. ZURITA AND M. KATZ**

**Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, U. N. T.  
Avda. Independencia 1800, S.M. de Tucumán, (4000).**

[mkatz@herrera.unt.edu.ar](mailto:mkatz@herrera.unt.edu.ar).

Valores de densidades, viscosidades e índices de refracción para el sistema isooctano + isoamil alcohol han sido determinados a 288.15, 298.15 y 308.15 K en todo el rango de concentración. Con esos valores se calculan los volúmenes molares de exceso ( $V^E$ ), viscosidades de exceso ( $\eta^E$ ), energías de activación del flujo viscoso ( $\Delta G^E$ ) y refracciones molares de exceso ( $R^E$ ).

La teoría de Prigogine-Flory-Patterson es aplicada para el cálculo de los volúmenes molares de exceso. Los modelos de Grunberg-Nissan, Katti-Chaudhri, Bloomfield-Dewan, Wu y GC-UNIMOD fueron utilizados para predecir viscosidades de exceso de donde la ecuación de Katti-Chaudhri es la que mejor se adapta a nuestros resultados experimentales por presentar menor desviación y las ecuaciones de Lorentz-Lorenz para las refracciones molares.

De los resultados obtenidos para las propiedades de exceso se confirma la presencia de fuerzas específicas de interacción entre los componentes, como se pueden observar en los dibujos respectivos.

E 19

**PREDICCIÓN DE VISCOSIDADES CON EL MODELO UNIMOD-GC EN SISTEMAS CONSTITUIDOS POR ALCOHOLES CON DERIVADOS METILADOS DE POLIETILENGLICOL**

S. Aznarez<sup>2</sup>, J.A. Amid, M.M.E. de Ruiz Holgado<sup>1</sup>, y E.L. Arancibia<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán. Av. Independencia 1800, 4000 San Miguel de Tucumán, Argentina  
[arancibia@herreria.unt.edu.ar](mailto:arancibia@herreria.unt.edu.ar).

<sup>2</sup>Departamento de Química, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400, 8300 Neuquén, Argentina.

El objetivo de este trabajo es brindar información sobre propiedades termofísicas y modelos que reproduzcan propiedades de pares de fluidos de trabajo con posibles uso en la tecnología de la refrigeración como posibles alternativas a las usadas convencionalmente. Se utilizan mezclas de dimetileter tetraetilenglicol en 2-propanol y en 2-butanol. Las viscosidades experimentales fueron determinadas a 288,15 K, 298,15 K, 308,15 K y 318,15 K y a presión atmosférica. Se presentan los valores de viscosidades experimentales y las obtenidas con el modelo GC-UNIMOD analizando la capacidad predictiva del mismo. Se considera a la molécula DMETEG conformada por tres combinaciones diferentes de grupos funcionales a través de las siguientes opciones. Opción 1: 2 CH<sub>3</sub>O; n+1 CH<sub>2</sub> y n-1 CH<sub>2</sub>O; Opción 2: 1 CH<sub>3</sub>O; n CH<sub>2</sub>O n CH<sub>2</sub> y 1 CH<sub>3</sub>; Opción 3: 2 CH<sub>3</sub>, n-1 CH<sub>2</sub> y n+1 CH<sub>2</sub>O donde n=4 en todos los casos. Los parámetros empleados son los correspondientes al modelo UNIFAC original y al modelo UNIFAC modificado por Tassios, donde se contempla el efecto de la temperatura a través del coeficiente de coordinación  $\nu$ .

E 20

**ELECTRÓNICA MOLECULAR: CONDUCTANCIA DE CAPAS MONOMOLECULARES**

A. Lempel, G. Gordillo, E.J. Calvo

INQUIMAE, DQIAyQF, FCEN – Universidad de Buenos Aires. C. Universitaria.  
Pabellón II. AR-1428 Buenos Aires. Argentina . Email: [alempel@journei.com.ar](mailto:alempel@journei.com.ar)

Se emplea la técnica desarrollada por G. Whitesides (Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 2316) consistente en una gota de mercurio modificada con una película autoensamblada de alquil-mercaptano (SAM1) que toma contacto con una superficie de oro modificada también con una película autoensamblada de alquilmercaptano (SAM2) formando una juntura molecular Au/SAM1/SAM2/Hg. Para ello se posiciona verticalmente la gota de mercurio mediante un tornillo micrométrico sobre la superficie de Au modificada con la SAM bajo líquido conteniendo tiol. Sobre la superficie de oro modificada con mercapto-propanosulfonato o mercaptoetilenamina se ensambla electrostáticamente un polímero redox de polialilamina que contiene un complejo de osmio, PAH-Os que actúa como cable molecular. Mediante un dispositivo electroquímico es posible modificar el estado redox del polímero de osmio desde Os(II) hasta Os(III). Se estudian las curvas corriente-voltaje de la juntura Au/SAM1/PAH-Os/SAM2/Hg para distintas relaciones Os(II)/Os(III) en el polímero-cable molecular. Se complementa el estudio mediante microscopía túnel.

**E 21  
ORAL**

**MODELADO DE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD EN  
SOLUCIONES QUE PRESENTAN ASOCIACION  
MOLECULAR**

**O.M. Ferreira<sup>1</sup>, G.M. Foco<sup>2</sup>, E.A. Brignole<sup>2</sup> and S.B. Bottini<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> LSRE, Faculdade de Engenharia – Universidade do Porto, 4200-465 Porto, Portugal

<sup>2</sup> PLAPIQUI, Universidad Nacional del Sur-CONICET, 8000 Bahía Blanca, Argentina

**E-mail: sbottini@plapiqui.edu.ar**

El modelado de coeficientes de actividad en soluciones altamente no-ideales como las formadas por compuestos que asocian y compuestos no-polares constituye un problema difícil. Los modelos termodinámicos tradicionales tienen dificultades en representar adecuadamente los coeficientes de actividad en estas soluciones, en todo el rango de composiciones. Mengarelli y col. (*Fluid Phase Equilibria*, 163, 195, 1999) han presentado un nuevo modelo a contribución grupal aplicado al cálculo de coeficientes de actividad en mezclas de agua, alcoholes e hidrocarburos. Este modelo adiciona al modelo UNIFAC tradicional, un término de asociación derivado de la teoría de Wertheim para fluidos con fuerzas atractivas altamente direccionadas. En este trabajo el modelo de Mengarelli y col. ha sido generalizado a soluciones que presentan asociación y solvatación molecular por enlace puente hidrógeno. Se han clasificado los grupos funcionales en base al número y tipo de sitios asociativos, diferenciándose el grado de asociación molecular a través de la densidad de grupos y utilizando una misma fuerza asociativa para todos ellos. El nuevo modelo es capaz de predecir adecuadamente coeficientes de actividad a dilución infinita y condiciones de equilibrio líquido-vapor y líquido-líquido, en una amplia variedad de sistemas que incluyen agua, alcoholes, ácidos carboxílicos, ésteres, cetonas, compuestos halogenados, hidrocarburos aromáticos y parafinas.

**E 22  
ORAL**

**DIFUSIÓN DE CLORURO EN HORMIGONES  
ELABORADOS CON DIFERENTES TIPOS DE CEMENTOS**

**E.M. Cremona, M.R. Barbosa**

**Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Avda. A. Del Valle 5737, Olavarría,**

**Argentina. E-mail: mbarbosa@fio.unicen.edu.ar**

Entre los factores que inciden en la corrosión del acero de refuerzo del hormigón, la presencia de cloruro, juega un rol importante. En consecuencia, la velocidad de transporte del ion a través del material pétreo es fundamental para la durabilidad del hormigón.

Actualmente se tiende a reemplazar parte del cemento empleado en la elaboración de los hormigones por diversos materiales como puzolanas, filler calcáreo, ceniza volante, escoria, ceniza de cáscara de arroz, etc. La composición de estos nuevos cementos con adiciones influye en las propiedades del hormigón.

La penetración de cloruro puede ocurrir por difusión en hormigón saturado con agua o por absorción/desorción al producirse ciclos de humedad/secado. Este fenómeno se produce en zonas sometidas a la acción de marcas y salpicaduras ocasionando una más rápida penetración.

En este trabajo se estudian la difusión de cloruro en hormigones elaborados con cemento portland sin adición, cementos binarios y ternarios conteniendo filler y escoria, sometidos a dos formas de exposición en NaCl: inmersión continua y ciclos de inmersión y secado. Se realizaron además ensayos de absorción y permeabilidad para cada tipo de hormigón. Los perfiles de cloruro obtenidos en las probetas sometidas a ciclos de inmersión y secado muestran mayores concentraciones del ion para profundidades equivalentes en todos los hormigones estudiados. Las probetas elaboradas con cemento binario conteniendo escoria presentan mayor resistencia a la penetración de cloruro. Existe muy buena correspondencia entre los resultados mencionados y los valores de absorción y permeabilidad de los diferentes hormigones. Los coeficientes de difusión fueron obtenidos empleando la segunda ley de Fick como modelo de ajuste

**E 23**  
ORAL

**CONTROVERSIA SOBRE LA EXISTENCIA DE FENÓMENO  
MULTICRÍTICO EN FLUIDOS IÓNICOS**

**Karin I. Gutkowski, Hugo L. Bianchi and M. Laura Japas**  
UAQ, CAC, CNEA, Av. del Libertador 8250, 1429-Buenos Aires  
ECyT, UNSAM, Alem 3901, 1651-San Andrés, Provincia de Buenos Aires.,  
mljapas@cnea.gov.ar

Recientes estudios teóricos, analíticos y de simulación computacional, han propuesto la existencia de un fenómeno interesante en fluidos iónicos: transiciones de fases de segundo orden entre una fase desordenada y otra ordenada, con ordenamiento del tipo antiferromagnético. Las predicciones establecen que ésta ocurriría cerca del punto crítico de la transición de primer orden entre fases desordenadas de diferente densidad de carga, revelando un acoplamiento entre los parámetros de orden de ambas transiciones.

Varios trabajos experimentales en sistemas iónicos han sugerido la posibilidad de interpretar sus resultados en base a la existencia de este fenómeno multicrítico.

En este trabajo presentamos propiedades de equilibrio en la región crítica para varios sistemas iónicos. Todos los sistemas estudiados son ternarios (agua + líquido orgánico +sal) con constantes dieléctricas entre 10 y 20. Las propiedades estudiadas fueron índice de refracción (como medida del parámetro de orden), conductividad eléctrica y turbidez (dispersión de luz). Nuestros resultados descartan la posibilidad de existencia de fenómenos multicríticos en los sistemas estudiados.

**E 24**  
ORAL

**ASOCIACIÓN IÓNICA DE  $\text{CuSO}_4$  ACUOSO:  
EFECTO DE LA TEMPERATURA**

**Lucila MENDEZ DE LEO<sup>1,3</sup>, Roberto FERNANDEZ PRINI<sup>1,2</sup> y Hugo BIANCHI<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>UAQ, CNEA, Av. Gral. Paz 1499 (1650) San Martín, Pcia Bs As.

<sup>2</sup>INQUIMAE, Pab II, Ciudad Universitaria, FCEN(UBA), Buenos Aires

<sup>3</sup>ECyT, UNSAM, Alem 3901 (1653) Villa Ballester, Pcia de Buenos Aires.

E-MAIL: bianchi@cnea.gov.ar

Se ha estudiado el efecto de la temperatura sobre la asociación iónica en  $\text{CuSO}_4$  acuoso utilizando una técnica espectrofotométrica. El par iónico presenta una banda de absorción en el UV que puede distinguirse de la del ion  $\text{Cu}^{2+}(\text{ac})$ . Esta diferencia ha permitido calcular la especiación de las soluciones estudiadas. Se han realizado medidas entre 298 y 473 K empleando un espectrofotómetro modular de fibras ópticas de cuarzo y una celda de flujo a alta presión construida íntegramente en titanio con ventanas de zafiro, desarrollada en nuestro grupo.

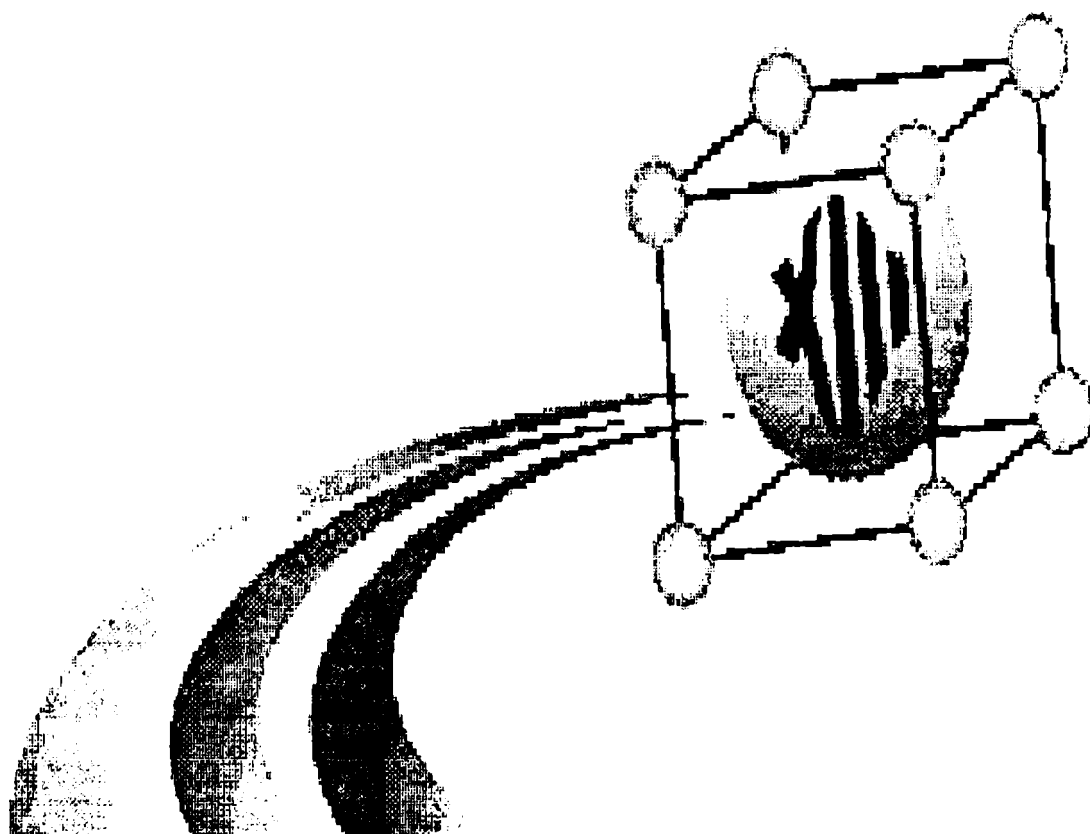
Se realizaron experimentos a distintas fuerzas iónicas, utilizando perclorato y triflato de sodio y cobre, de modo de poder calcular la constante del equilibrio de asociación, extrapolando a dilución infinita el cociente de las concentraciones de equilibrio. Se realizaron también algunos experimentos adicionales para evaluar la contribución de otros equilibrios entre las especies presentes en las condiciones experimentales de este trabajo, para ello se ha desarrollado un programa de cálculo para equilibrios múltiples acoplados.

La información experimental sobre la constante de equilibrio de asociación de  $\text{CuSO}_4(\text{ac})$  se ha utilizado para calcular las cantidades termodinámicas de asociación y su variación con la temperatura. Estos resultados se comparan con las predicciones de modelos primitivos.



*SECCIÓN F*

*FISICOQUÍMICA  
DE SÓLIDOS*



**XIII Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y Química Inorgánica.  
7 al 10 de Abril – 2003 - Bahía Blanca - Argentina**

## SECCIÓN F

| Sección y Número | TÍTULO   | AUTORES   | Modalidad |
|------------------|--|---|-----------|
| F1               | <b>RETIRADO</b>  |   |           |
| F2               | ESTRUCTURA CRISTALINA DE TIMOQUINONA POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE ALTA RESOLUCIÓN  | A. M. Benavente, A. B. Raschi, E. Romano, M.A.A. Molina, S. Pagola, P.W. Stephens | Poster    |
| F3               | EXTENSION DEL USO DEL SHELL PARA ESTUDIAR LAS PROPIEDADES ELASTICAS DE SOLIDOS A ALTAS PRESIONES.  | Horacio Rodríguez, Gustavo D. Barrera y Alicia Batana                             | Poster    |
| F4               | <b>RETIRADO</b>  |   |           |
| F5               | EMPLEO DE COMPUESTOS TIPO-NASICON EN DISPOSITIVOS SENSORES DE Na <sup>+</sup> .  | R.O. Fuentes, F. Figueiredo, F. Marques y J. Franco                               | Oral      |
| F6               | PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS TIPO-NASICON   | R.O. Fuentes, F. Figueiredo, F. Marques y J. Franco.                              | Poster    |
| F7               | CINETICA DE SORCIÓN DE YODO POR Ag <sub>7</sub> PO <sub>4</sub> I <sub>4</sub>   | J. R. Casanova y J. I. Franco   | Poster    |
| F8               | <b>RETIRADO</b>  |   |           |
| F9               | SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE La <sub>(0.625-x)</sub> A <sub>x</sub> Ca <sub>0.375</sub> MnO <sub>3</sub>  | A.G.Leyva, M.Quintero, V.Lorenzo, G.Polla, P.Konig, D.Vega, F.Parisi, P.Levy      | Oral      |
| F10              | CARACTERIZACIÓN DE APATITAS FORMADAS SOBRE SUPERFICIES MODIFICADAS DE TITANIO  | A.G.Leyva, H.Huck, M.Rosenbuch, C.Oviedo y M.A.R.de Benyacar                      | Poster    |
| F11              | CONTRIBUCIONES VIBRACIONALES Y ENTRÓPICAS AL EQUILIBRIO DE FASE CALCITA - ARAGONITA  | Clarisa Cienfuegos y Gustavo Daniel Barrera                                       | Poster    |
| F12              | SÍNTESIS Y MEDICIÓN DE PROPIEDADES ELÉCTRICAS DE LA SOLUCIÓN SÓLIDA Ba <sub>5-x</sub> La <sub>x</sub> Nb <sub>4-x</sub> Ti <sub>x</sub> O <sub>15-δ</sub> (0 = X = 4). | Valeria C. Fuertes, Juan M. De Paoli y Raúl E. Carbonio                           | Poster    |
| F13              | REFINAMIENTO ESTRUCTURAL DE Nd[Fe(CN) <sub>6</sub> ] <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O Y ESTUDIO DE SUS PRODUCTOS DE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA.                               | M. C. Navarro, E. V. Pannunzio-Miner, S. Pagola, M. I. Gómez y R. E. Carbonio     | Oral      |
| F14              | ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE MICROALEANTES EN LA RESISTENCIA DE ACEROS HIDROGENADO  | J. Lombardich, M. Saggio, O. Caló, L. Moro, A. Juan                               | Poster    |
| F15              | UN NUEVO ENFOQUE PARA LA PREDICCIÓN DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA DE SÓLIDOS INORGÁNICOS USANDO DATOS DE DIFRACCIÓN DE POLVOS"   | Luis Reinaudi, Víctor A. Toselli, Ezequiel P. M. Leiva y Raúl E. Carbonio.        | Oral      |

|     |  |   |        |
|-----|--|---|--------|
| F16 | COMPORTAMIENTO CRISTAL LÍQUIDO DE MEZCLAS DE ALCOXIBENZOATOS DE Ru (II,III) CON DODECANO   | M. Rusjan, B. Donnio, B. Heinrich, F.D. Cukiernik y D. Guillon  | Poster |
| F17 | CARBOXILATOS QUIRALES DE RODIO: ESTRATEGIA HACIA CL. COLUMNARES FERROELECTRICOS  | M. A. Castro, M. Blasco, M. Rusjan, A. Zelcer y F. D. Cukiernik* <sup>ck</sup>  | Poster |
| F18 | ESTRUCTURAS CRISTALINAS: HERRAMIENTA PARA INTERPRETAR LA ARQUITECTURA DE FASES CL  | M. A. Castro <sup>1</sup> , Z. Chaia <sup>1</sup> , A. Zelcer <sup>1</sup> , M. Rusjan <sup>1</sup> , O. Piro, E. E. Castellano y F. D. Cukiernik | Poster |
| F19 | REDES DE ELASTOMEROS MESOMORFOS BASADOS EN TRIFENILENOS: SINTESIS, CARACTERIZACION Y PROPIEDADES CL DE MONOMEROS FUNCIONALIZADOS                         | A. Zelcer, B. Donnio, F. D. Cukiernik y D. Guillon <sup>7</sup>   | Poster |
| F20 | POLARIZABILIDADES IONICAS A ALTAS PRESIONES: ESTUDIO EN SÓLIDOS MÁS COMPLEJOS  | Batana, M.C. Monard y J.A.O. Bruno  | Poster |
| F21 | ESTUDIO DE LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA DEL CsCuCl <sub>3</sub> , PURO Y DOPADO  | Gabriela M. Lescano, Maria Rosa Prat, Aurora E. Sagua y J. Bazán  | Poster |
| F22 | DIFUSION DE IONES PLATA EN UN VIDRIO SÓDICO ¿CONTRIBUCIÓN DE UNA REACCIÓN QUÍMICA?   | J.C. Bazán, C.V. Janyistabro, M.E. Sola   | Poster |
| F23 | ESTUDIO DEL REFORMADO SECO DE METANOSOBRE CATALIZADORES Pd/ $\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> y Pd/ZrO <sub>2</sub>                               | Pablo Gastón Schulz, Gloria Gonzalez, Claudia Quincoces y Carlos Gigola   | Poster |
| F24 | PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL SISTEMA VITREO xAg <sub>2</sub> O . (1-x) V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> . 2TeO <sub>2</sub>                               | R.S. Pettigrosso, M.A. Frechero, M. Villary R.A. Montani  | Poster |
| F25 | ALEACIONES Mg-Cu: ESTUDIO DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS  | R. Fracchia, R. Hojvat, M.R. Soriano, M. Yu. Lavrentiev, N.L. Allan <sup>1</sup> y G.D. Barrera   | Poster |
| F26 | CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DEL SISTEMA VÍTREO xAg <sub>2</sub> O . (1-x) V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> . 2TeO <sub>2</sub>                              | M.A. Frechero, O.V. Quinzani y R.A. Montani   | Poster |
| F27 | CORRELACION ENTRE PROPIEDADES ELÉCTRICAS Y ESTRUCTURALES DEL SISTEMA VÍTREO xLi <sub>2</sub> O . (1-x) V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> . 2TeO <sub>2</sub> | M.A. Frechero, Juan M. Sieben y R.A. Montani  | Poster |
| F28 | ESTUDIO DEL ESTADO SOLIDO DE PSEUDOSPOLIMORFOS DE AZITROMICINA   | S. Faudone, S. Cuffini, M. Rubio, C. Fernández, R. Badini, V. Dabbene, A. Karlsson  | Poster |

|      |  |   |        |
|------|--|---|--------|
| F29  | ESTABILIDAD ELECTROQUÍMICA DE MONOCAPAS AUTOENSAMBLADAS DE ALCANOTIOLATOS SOBRE ELECTRODOS DE Au (111), Ag(111) Y Cu (111) | O. Azzaroni, M.E. Vela, P. Carro, R.C. Salvarezza             | Poster |
| F 30 | DISCUSION DE UN MODELO NO ALEATORIO PARA DESCRIBIR LA RUPTURA DIELECTRICA EN SÓLIDOS                                       | C. De Michelis, M.C. Cordero, E.E. Mola y J.L. Vicente        | Poster |
| F31  | SÍNTESIS Y CARACTERIZACION DE CRISTALES LIQUIDOS. DIESTERES ACODADOS.  | S. Hernández, P. Del Rosso y R. Garay                         | Poster |
| F32  | SÍNTESIS Y CARACTERIZACION DE DIMEROS CON UNIDADES ANTRACENICAS  | M. Almassio, R. Montani, R. Garay                             | Poster |
| F33  | SINTESIS Y CARACTERIZACION DE CRISTALES LIQUIDOS CON UNIDADES OXIETILENICAS  | R. Montani, P. Del Rosso, S. Hernández, M. Almassio, R. Garay | Poster |
| F34  | DISCUSIÓN DE UN MODELO NO ALEATORIO PARA DESCRIBIR LA RUPTURA DIELECTRICA EN SOLIDOS.                                      | C. De Michelis, M.C. Cordero, E.E. Mola, J.L. Vicente.        | Poster |

F 1 RETIRADO

F2

**ESTRUCTURA CRISTALINA DE TIMOQUINONA POR  
DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE ALTA RESOLUCIÓN**

A. M. Benavente<sup>1</sup>, A. B. Raschi<sup>1</sup>, E. Romano<sup>1</sup>, M.A.A. Molina<sup>1</sup>, S. Pagola<sup>2</sup>, P.W. Stephens<sup>3</sup>.

<sup>1</sup>Fac. de Bioqca., Qca. y Fcia., Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471,  
4000, Tucumán, Argentina. [albe@ut.edu.ar](mailto:albe@ut.edu.ar)

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad  
Universitaria, 5000, Córdoba, Argentina. [sipagola@yahoo.com](mailto:sipagola@yahoo.com)

<sup>3</sup>Department of Physics and Astronomy, SUNY at Stony Brook, NY, 11789-3800,  
USA.

El presente trabajo describe la estructura cristalina de la timoquinona. La estructura cristalina fue determinada mediante "localización molecular". Se utilizó un modelo de la geometría molecular construido a partir de geometrías de fragmentos relacionados extraídos de la "Cambridge Structural Database". Se aplicó el programa PSSP (*Powder Structure Solution Program*) para la generación de estructuras de prueba, seleccionándose aquella que produjo el mejor acuerdo entre los difractogramas calculado y experimental. Se realizó un refinamiento de la estructura mediante el método de Rietveld. Se estableció que la timoquinona comercial. (Sigma) cristaliza en el sistema triclinico, grupo espacial P1, con parametros de celda  $a=6.7392(3)\text{Å}$ ,  $b=6.9313(3)\text{Å}$ ,  $c=10.5010(5)\text{Å}$ ,  $\alpha=91.408(8)^\circ$ ,  $\beta=97.566(5)^\circ$ ,  $\gamma=77.144(4)^\circ$ ;  $Z=2$ . Se analizó el comportamiento térmico de la misma mediante estudios: Termogravimétrico (TGA), Calorimetría Diferencial (DTA) y de Barrido (DSC). El punto de fusión determinado fue  $47^\circ\text{C}$  y su entalpia de fusión  $12.76\text{ kJ/mol}$ .

F3

**EXTENSION DEL USO DEL SHELL PARA ESTUDIAR  
LAS PROPIEDADES ELASTICAS DE SOLIDOS A  
ALTAS PRESIONES.**

**Horacio RODRIGUEZ<sup>1</sup>, Gustavo D. BARRERA<sup>2</sup> y Alicia BATANA<sup>3</sup>.**  
**1-Depto. de Física, Fac. Ing., 2-Depto. Qca, Fac. Cs Nat., UNPSJB, C.Riv.**  
**3-Dpto. QIAyQF, Fac. Cs., Ex., Fis., y Nat., UBA, Pab.2, C.Univ. BsAs.**  
**ahr@unpata.edu.ar**

Como mencionamos en un trabajo previo, extendimos el uso del programa SHELL (<http://quimica.unp.edu.ar/gdb>) al estudio de propiedades elásticas de sólidos y su variación con la presión, introduciendo átomos con momentos multipolares para la representación de los iones de la serie isoestructural: MgO, CaO, SrO y BaO.(SHELL EXTENDIDO). Inicialmente y en primera aproximación, la forma del potencial implementado y la inclusión de los formalismos correctos para trabajar a altas presiones, produjeron buenos resultados de  $C_{ij}$ .

Sin embargo, los signos adecuados de  $C_{ij}$  para la serie isoestructural no se pudieron reproducir.

En el presente trabajo proponemos una metodología que corrige este problema en el uso del Shell Ext., cuando se aplica en estudios de constantes elásticas de sólidos a bajas y altas presiones.

Para lo cual se requirió:

1. Estudio del efecto de la forma de potencial utilizada.
2. Desarrollo de un criterio físico para la parametrización.
3. Desarrollo e implementación del programa de optimización.
4. Optimización de las cargas incluidas en el Shell Ext.

Teniendo en cuenta esos aspectos estamos ahora en condiciones de realizar cálculos a diferentes presiones

**F 4 RETIRADO**

**F5  
ORAL**

**EMPLEO DE COMPUESTOS TIPO-NASICON EN  
DISPOSITIVOS SENSORES DE Na<sup>+</sup>.**

**R.O. Fuentes<sup>(1,3)</sup>, F. Figueiredo<sup>(2)</sup>, F. Marques<sup>(3)</sup> y J. Franco<sup>(1),(1)</sup> CINSO, CITEFA-  
CONICET. J.B. de la Salle 4397, Villa Martelli, Bs As, Argentina.**

**<sup>(2)</sup> Dept. de Ciencia y Tecnologia, Universidade Aberta, Lisboa, Portugal.**

**<sup>(3)</sup> UIMC-Dept. de Eng. Cerâmica e do Vidro, Universidade de Aveiro, Portugal.**

**E-mail: [rfuentes@citefa.gov.ar](mailto:rfuentes@citefa.gov.ar), [jfranco@citefa.gov.ar](mailto:jfranco@citefa.gov.ar)**

En trabajos previos, realizados por los autores de este trabajo, se reportó la obtención de compuestos tipo-NASICON a partir del empleo de la fase tetragonal del ZrO<sub>2</sub> como compuesto de partida, reemplazando al ZrO<sub>2</sub> monoclinico en el método clásico. Esto permitió obtener NASICON libre de segundas fases durante la síntesis. Además, se logró sinterizar muestras con muy buenas propiedades de densidad y eléctricas, cuyos valores de conductividad fueron del orden o mejores que los obtenidos por el método de sol-gel.

En el presente trabajo, los compuestos tipo-NASICON fueron empleados como membrana de intercambio iónico en un sensor de Na<sup>+</sup>. Para esto, se realizó el análisis de soluciones de NaCl, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> y NaCl/Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> con diferentes concentraciones de Na<sup>+</sup>. De los resultados obtenidos, fue posible dar una interpretación del limite de detección y de la influencia sobre éste de la disolución del ion Cl<sup>-</sup> proveniente de los electrodos de Ag/AgCl que se emplean en este tipo de sensor. Además fue posible determinar como los aniones influyen en la detección con sensores de este tipo.

**F6**

**PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS TIPO-NASICON**

**R.O. Fuentes<sup>(1,3)</sup>, F. Figueiredo<sup>(2)</sup>, F. Marques<sup>(3)</sup> y J. Franco<sup>(1)</sup>.**

**<sup>(1)</sup> CINSO, CITEFA-CONICET. J.B. de la Salle 4397, Villa Martelli, Bs As,  
Argentina.**

**<sup>(2)</sup> Dept. de Ciencia y Tecnologia, Universidade Aberta, Lisboa, Portugal.**

**<sup>(3)</sup> UIMC-Dept. de Eng. Cerâmica e do Vidro, Universidade de Aveiro, Portugal.**

**E-mail: [rfuentes@citefa.gov.ar](mailto:rfuentes@citefa.gov.ar), [jfranco@citefa.gov.ar](mailto:jfranco@citefa.gov.ar)**

NASICON ("sodium superionic conductor") es un material cerámico, conductor iónico por Na<sup>+</sup>. En la actualidad este electrolito sólido es empleado en sensores de gases (CO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub>) y en dispositivos ISE (ion selective electrode). Al emplear circonia nanocrystalina más reactiva, ZrO<sub>2</sub> - 3% molar Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (TZP) en su fase tetragonal (en reemplazo de ZrO<sub>2</sub> monoclinica tradicionalmente empleada), fue posible sintetizar el compuesto (aquí denominado NASICON-TZP) a más bajas temperaturas y eliminar por completo la presencia de segundas fases no deseadas. Además se logró reducir la temperatura de sinterizado sin que esto afectara la densidad de las muestras (99% de la densidad teórica del NASICON). Las propiedades eléctricas de muestras densas fueron estudiadas mediante la técnica de espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS), complementando los estudios realizados con microscopia electrónica de barrido (SEM) y difracción de rayos X (XRD). La microestructura de las muestras (fuertemente influenciada por las condiciones de procesado) juega un papel preponderante en las propiedades eléctricas. La conductividad a temperatura ambiente de las muestras tipo-NASICON obtenida empleando TZP, fue un orden mayor que la obtenida empleando ZrO<sub>2</sub> monoclinica. Resultados obtenidos por este metodo son comparables, y en algunos casos mejores, que las reportados con muestras de NASICON obtenidas por el método de sol gel. Además un estudio de la reactividad con el agua fue realizado en polvos y en muestras densas.

F7

**CINETICA DE SORCIÓN DE YODO POR  $\text{Ag}_7\text{PO}_4\text{I}_4$**

**J. R. Casanova y J. I. Franco**

**CINSO, CITEFA-CONICET.**

**J.B. de la Salle 4397, B1603ALO-Villa Martelli, Bs As, Argentina.**

**jfranco@citefa.gov.ar**

El electrolito sólido  $\text{Ag}_7\text{PO}_4\text{I}_4$  (API) utilizado en un dispositivo electroquímico para la detección de gas iodo, presenta una importante sorción del gas, afectando la duración del dispositivo.

En medio húmedo, la velocidad de sorción es directamente proporcional a la raíz cuadrada de la presión de vapor de la fuente de yodo e independiente de la masa de yodo absorbida. Se arriba a un estado final de equilibrio que es el mismo cualquiera sea la presión de vapor de la fuente.

Para atmósfera seca, las isotermas también dependen de la presión de vapor de yodo de la fuente y, además, son funciones de la concentración de yodo en el medio sólido. Es así que exhiben una primera etapa de dependencia con la raíz cuadrada del tiempo ( $t^{1/2}$ ) y una segunda etapa con una cinética gobernada por reacción química reversible de primer orden en la reacción directa. En este caso, la fracción molar de yodo absorbido y la constante de velocidad de reacción son funciones lineales de la presión de la fuente de yodo ( $p_{I_2}$ ) y de su raíz cuadrada ( $p_{I_2}^{1/2}$ ) respectivamente.

**F 8 RETIRADO**

F9  
ORAL

### SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE $\text{La}_{(0.625-x)}\text{A}_x\text{Ca}_{0.375}\text{MnO}_3$

**A.G.Leyva, M.Quintero, V.Lorenzo\*, G.Polla, P.Konig, D.Vega, F.Parisi,  
P.Levy**

**Comisión Nacional de Energía Atómica. Dpto. Física- \*Dpto. Combustibles Nucleares  
Av Gral Paz 1499 (1650) Bs.As. (leyva@cnea.gov.ar)**

En este trabajo se presentan las modificaciones estructurales en el compuesto  $\text{La}_{(0.625-x)}\text{A}_x\text{Ca}_{0.375}\text{MnO}_3$  que surgen por efecto del sustituyente A (Pr o Nd) y su correlación con propiedades de transporte y magnéticas. Se comparan los resultados obtenidos por dos métodos de síntesis: polimerización de citratos y desnitración en horno a microondas.

Las muestras estudiadas con concentraciones x entre 0.1 y 0.625 fueron caracterizadas mediante difracción de rayos-X, microscopía electrónica de barrido (SEM, EDAX), mediciones de resistividad y magnetismo. Se determinaron los parámetros de red, distancias y ángulos por ajuste de datos de difracción de rayos X de polvo con el método de Rietveld.

La variación de los parámetros de red con la concentración (x) presenta la misma tendencia para ambos sustituyentes, Pr y Nd. Esta variación se ve influenciada por el distinto radio catiónico de Pr(III) ( $r=1.14\text{Å}$ ) y Nd(III) ( $r=1.09\text{Å}$ ), los parámetros de red del sistema conteniendo Nd son menores que los que se observan para Pr. El parámetro a se mantiene en un valor constante hasta  $x=0.5$  para Pr, a partir de esta concentración disminuye abruptamente. En el caso del Nd esta discontinuidad se presenta para  $x=0.3$ , también en estas concentraciones se observa una discontinuidad en el parámetro c. El parámetro b disminuye en forma continua en este ámbito de concentraciones, para ambos sistemas. Si bien la estructura cristalina sufre modificaciones en este ámbito de concentraciones el sistema permanece monofásico.

F10

### CARACTERIZACIÓN DE APATITAS FORMADAS SOBRE SUPERFICIES MODIFICADAS DE TITANIO

**A.G.Leyva<sup>ab</sup>, H.Huck<sup>a</sup>, M.Rosenbuch<sup>c</sup>, C.Oviedo<sup>ad</sup> y M.A.R.de Benyacar<sup>a</sup>**

**<sup>a</sup>Comisión Nacional de Energía Atómica. Av Gral Paz 1499 (1650) Bs.As. <sup>b</sup>UNSAM,  
<sup>c</sup>CONICET, <sup>d</sup>CIC. E-mail: (leyva@cnea.gov.ar)**

Los implantes de titanio se usan satisfactoriamente en humanos debido a sus excelentes propiedades mecánicas, su estabilidad química, y esencialmente su buena biocompatibilidad. La buena biocompatibilidad se atribuye al film de  $\text{TiO}_2$  superficial. Como otros materiales bioactivos el titanio permite la oscointegración, sin embargo no es clara la relación entre las condiciones superficiales y las propiedades del material que inicialmente se deposita en la interfase Ti-fluidos biológicos.

Con el propósito de estudiar los efectos que provocan en la mineralización "in vitro" distintas superficies de Ti se ha caracterizado el material depositado sobre titanio pulido (Ti) y titanio pulido recubierto con un film de carbono amorfo (Ti-DLF). El depósito fue obtenido mediante la circulación continua de un fluido tipo biológico a temperatura constante de  $36^\circ\text{C}$  durante tiempos variables. La superficie de los sustratos Ti y Ti-DLF fue caracterizada por difracción de rayos X y por XPS.

La calidad de la superficie de Ti modifica la morfología del material depositado (observado por microscopía óptica y electrónica) obteniéndose un depósito uniforme tipo película gruesa sobre el Ti-DLF y un material con mayor textura sobre el Ti pulido. La determinación de la composición mediante análisis dispersivo en energía (EDS) se asemeja en todos los casos a la típica de una apatita carbonatada. El material observado mediante microscopía óptica con luz polarizada muestra un comportamiento casi anisotrópico en el caso del depósito sobre Ti-DLF debido a la baja birrefringencia de la hidroxiapatita y crecimiento tipo esferulita en el caso del depósito sobre Ti pulido.

F11

**CONTRIBUCIONES VIBRACIONALES Y ENTRÓPICAS  
AL EQUILIBRIO DE FASE CALCITA - ARAGONITA**

**Clarisa Cienfuegos<sup>a</sup> y Gustavo Daniel Barrera<sup>b</sup>**

**DOIQyQF, FCEyN, UBA, Ciudad Universitaria, Pab. II, (1428) Buenos Aires**

**DO, FCN-UNPSJB, Ciudad Universitaria, (9000) Comodoro Rivadavia.**

**E-MAIL: gdb@quimica.unp.edu.ar**

El equilibrio entre calcita y aragonita, dos polimorfos del  $\text{CaCO}_3$ , es uno de los ejemplos modelo, no sólo en ciencias de la tierra sino también en biología ya que la aragonita es el constituyente mayoritario de las conchas marinas. Además de su importancia como sistema modelo, el equilibrio involucrado permite ilustrar la importancia de las distintas contribuciones a la energía libre.

Experimentalmente se encuentra que  $\Delta H_f(\text{aragonita}) < \Delta H_f(\text{calcita})$  lo cual indicaría que la aragonita sería la fase más estable, en aparente contradicción con los experimentos ya que a condiciones ambiente la calcita es la fase más estable. Esta aparente paradoja se soluciona si se tiene en cuenta la contribución de la entropía a la energía libre.

En este trabajo mostramos que los resultados de cálculos *ab initio* indicarían que  $\Delta H_f(\text{aragonita}) > \Delta H_f(\text{calcita})$ , en contradicción con los experimentos. Esta situación se revierte si a la contribución estática obtenida en los cálculos de estructura electrónica se suma la contribución vibracional, estimada por cálculos de dinámica de redes. Para concluir que la calcita es la fase más estable, encontramos que es necesario además considerar la contribución de la entropía vibracional resultando  $\Delta G_f(\text{aragonita}) > \Delta G_f(\text{calcita})$ .

Mostramos así, con este sistema paradigma, la necesidad de considerar no sólo la contribución vibracional a la entalpía sino también la contribución entrópica para explicar incluso cualitativamente las observaciones experimentales.

F12

**“SÍNTESIS Y MEDICIÓN DE PROPIEDADES ELÉCTRICAS  
DE LA SOLUCIÓN SÓLIDA  $\text{Ba}_{5-x}\text{La}_x\text{Nb}_{4-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15-\delta}$   
( $0 \leq x \leq 4$ ).”**

**Valeria C. Fuertes, Juan M. De Paoli y Raúl E. Carbonio.**

**Dpto. de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, C. P. 5000 Córdoba.**

**E-mail: jdepaoli@mail.fcq.unc.edu.ar**

Se estudiaron las propiedades eléctricas de los compuestos pertenecientes al sistema  $\text{Ba}_{5-x}\text{La}_x\text{Nb}_{4-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15-\delta}$  ( $0 \leq x \leq 4$ ). Esta serie de compuestos se obtuvo a partir de diferentes tratamientos térmicos en atmósfera reductora de las fases  $\text{Ba}_{5-x}\text{La}_x\text{Nb}_{4-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15}$ . Los materiales de partida son el resultado de sucesivas sustituciones aliovalentes de los cationes A y B de la Perovskita  $\text{Ba}_5\text{Nb}_4\text{O}_{15}$ . Dichas muestras fueron analizadas por difracción de rayos X convencionales. Mediante la utilización de análisis Rietveld, se refinaron los parámetros estructurales de dichas muestras. Se encontró un comportamiento lineal de los parámetros de celda en función del parámetro composicional, es decir que la serie cumple con la ley de Vegard, al igual que la serie oxidada, lo cual demuestra que son isoestructurales con el  $\text{Ba}_5\text{Nb}_4\text{O}_{15}$ . Se realizaron medidas de resistividad eléctrica en función de la temperatura en el intervalo de 10 a 300K utilizando un crióstato de ciclo cerrado. Los valores obtenidos de resistividad eléctrica para estas muestras están comprendidos en un intervalo bastante amplio (entre  $10 \Omega \cdot \text{cm}$  y  $10^6 \Omega \cdot \text{cm}$  aproximadamente), sin embargo todas las fases reducidas presentan un comportamiento semiconductor. Se analizaron los mecanismos de conducción en función de los distintos modelos existentes en la literatura, encontrándose que en todos los casos se obtiene un mecanismo de tipo “variable range hopping” obteniéndose parámetros comparables a otros compuestos reducidos.

**F13**

**REFINAMIENTO ESTRUCTURAL DE Nd[Fe(CN)<sub>6</sub>]·4H<sub>2</sub>O Y ESTUDIO DE SUS PRODUCTOS DE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA.**

**M. C. Navarro<sup>1</sup>, E. V. Pannunzio-Miner<sup>2</sup>, S. Pagola<sup>2</sup>, M. I. Gómez<sup>1</sup> y R. E. Carbonio<sup>2</sup>.**

**<sup>1</sup>Instituto de Química Inorgánica. Fac. de Bioq., Oca. y Farm. Univ. Nac. de Tucumán. Ayacucho 491, 4000 S. M. de Tucumán.**

**<sup>2</sup>INFIQC. Departamento de Físico Química. Fac. de Ciencias Químicas. Univ. Nac. de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba.**

**Email: caronava@unt.edu.ar**

Se realizó el refinamiento estructural de Nd[Fe(CN)<sub>6</sub>]·4H<sub>2</sub>O por medio de análisis Rietveld de patrones de difracción de rayos x (DRX) de radiación sincrotrón. El refinamiento se realizó en el grupo espacial Cmcn (Nro. 63). Los parámetros de red refinados son: a= 7.47395(1), b=12.91910(2), c=13.80055(2) Å. Se refinaron también las posiciones atómicas y parámetros de temperatura anisotrópicos. Por medio de Análisis Térmogravimétrico(ATG) y Termofidiferencial (DTA) se determinaron las distintas etapas de descomposición térmica. Se analizaron los productos de descomposición térmica por medio de DRX y espectroscopía IR. Se encontró que a temperaturas tan bajas como 350° C se sintetiza la perovskita NdFeO<sub>3</sub>. Esta temperatura es mucho más baja que la informada por otros autores. Esta metodología abre las puertas a la posibilidad de preparación de óxidos complejos en tamaños de partícula muy pequeños y eventualmente de nano-partículas. Se realizó el refinamiento estructural de muestras de NdFeO<sub>3</sub> preparadas en el intervalo 350-600° C. No se encontró una variación sustancial de los parámetros de red con la temperatura de síntesis.

**F14**

**ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE MICROALEANTES EN LA RESISTENCIA DE ACEROS HIDROGENADO**

**Autores: J. Lombardich, M. Saggio, O. Caló, L. Moro, A. Juan**

**Av Alem 1253 - 8000 Bahía Blanca**

**E-mail : lmoro@criba.edu.ar**

Se estudian dos aceros ferríticos usados frecuentemente en plantas petroquímicas y en instalaciones de centrales eléctricas en presencia de medios hidrogenantes y a altas temperaturas. Se observa que en condiciones de servicio sus propiedades mecánicas varían, disminuyendo la resistencia mecánica; lo cual se atribuye al hidrógeno atómico que difunde en el interior del metal localizándose en defectos de la red donde se acumula y forma hidrógeno molecular generando un estado de tensión interna que provoca la fragilización del metal.

El objetivo de este trabajo es determinar la influencia de los microaleantes en la variación de la resistencia mecánica cuando los aceros (2 ¼ Cr 1Mo y 1Cr 1 Mo ¼V) son sometidos a ensayos de creep por torsión en las condiciones previamente mencionadas.

Previamente al ensayo el material es cargado con hidrógeno por medio de un ataque electrolítico y se deben optimizar las condiciones de carga (temperatura, densidad de corriente, electrolito a usar, etc.) para evitar un excesivo ataque superficial. El seguimiento se realiza por medio de microcopia electrónica de barrido.

De los ensayos de creep se calcula la energía de activación en el material mencionado y en las distintas condiciones fijadas, lo cual permite predecir mecanismos de fragilización.

**F15  
ORAL**

**“UN NUEVO ENFOQUE PARA LA PREDICCIÓN DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA DE SÓLIDOS INORGÁNICOS USANDO DATOS DE DIFRACCIÓN DE POLVOS”**

**Luis Reinaudi<sup>1</sup>, Víctor A. Toselli<sup>2</sup>, Ezequiel P. M. Leiva<sup>1</sup> y Raúl E. Carbonio<sup>2</sup>.**  
**<sup>1</sup>Unidad de Matemática y Física, <sup>2</sup>Depto. de Físicoquímica. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba.**  
**e-mail: luis@umf.fcq.unc.edu.ar.**

En este trabajo se propone un nuevo enfoque para el problema de la predicción de estructuras cristalinas de sólidos inorgánicos a partir del método de templado simulado basado en el agregado de un término dependiente de la difracción en la función de costo. Dicho término se plantea de modo tal que tiene en cuenta el perfil completo del patrón de difracción, lo que evita el problema de la asignación incorrecta durante una extracción de intensidades cuando el difractograma presenta un grado considerable de superposición entre los picos, y al mismo tiempo puede ser evaluado con un costo computacional significativamente menor al de otras metodologías planteadas a partir del perfil completo.

Paralelamente, la forma funcional de dicho término contribuye a aumentar la diferencia entre el mínimo global y los mínimos espurios al tiempo que no interfiere con la exploración del espacio de configuraciones cuando el sistema se encuentra lejos de dicho mínimo global.

Este nuevo enfoque fue aplicado al estudio de una serie de óxidos mixtos de diversa complejidad, lográndose un gran aumento en la eficiencia para obtener la estructura correcta en todos los casos estudiados, aun en los más complejos, donde el número de grados de libertad del sistema asciende a 90 (30 átomos independientes en la celda unidad)

**F16**

**COMPORTAMIENTO CRISTAL LÍQUIDO DE MEZCLAS DE ALCOXIBENZOATOS DE Ru (II,III) CON DODECANO**  
**M. Rusjan\*, B. Donnio<sup>#</sup>, B. Heinrich<sup>#</sup>, F.D. Cukiernik\*<sup>&</sup> y D. Guillou<sup>#</sup>**

**\*INQUIMAE-FCEN-UBA (Arg); <sup>#</sup>GMO-IPCMS (Francia); <sup>&</sup>ICI-UNGS (Arg)**  
**FCEN, Pabellón II, Cdad. Universitaria, C1428EHA, Buenos Aires, Argentina**

**E-mail: marciar@qi.fcen.uba.ar**

Los cristales líquidos (CL) basados en carboxilatos de rutenio de valencia mixta (II,III) presentan una estructura electrónica que puede dar lugar a interesantes propiedades de eventual aplicación tecnológica. Para ello deben cumplir ciertos requerimientos concernientes al rango térmico de existencia de las mesofases, estabilidad térmica y procesabilidad.

Si bien estos compuestos presentan alta estabilidad térmica y bajas temperaturas de transición, la alta viscosidad de las mesofases impide su orientación macroscópica eficiente por las técnicas clásicas. Por lo tanto decidimos mejorar la procesabilidad de estos compuestos incrementando su fluidez mediante la adición de un solvente hidrocarbonado. Se estudiaron mezclas de distintos compuestos con dodecano.

En las mezclas de hasta 40-60 % en peso de dodecano no se altera la naturaleza de las mesofases obtenidas para los compuestos puros (columnares hexagonales), sin embargo se reduce notoriamente la viscosidad de las mismas a la vez que cae abruptamente la temperatura de aparición de la fase CL. Para concentraciones mayores de solvente y altas temperaturas, las muestras presentan también una mesofase columnar nemática previa al pasaje al líquido isotrópico. A nivel estructural, la incorporación de solvente resulta en un hinchamiento de las columnas, lo que conlleva a un aumento de la distancia intercolumnar hasta el punto de perder el orden hexagonal para dar la fase nemática.

**F17**

**CARBOXILATOS QUIRALES DE RODIO: ESTRATEGIA HACIA CL COLUMNARES FERROELECTRICOS**

M. A. Castro, M. Blasco, M. Rusjan, A. Zelcer y F. D. Cukiernik<sup>\*&</sup>

<sup>&</sup>ICI-UNGS; <sup>\*</sup>INQUIMAE-FCEN-UBA

Instituto de Ciencias, UNGS, Roca 850, San Miguel, 1663 Buenos Aires

E-mail: [fcukierni@ungs.edu.ar](mailto:fcukierni@ungs.edu.ar)

La introducción de centros quirales en cristales líquidos calamíticos (CL basados en moléculas alargadas) conduce a estructuras helicoidales como la fase Sc\*, base de la mayor parte de los CL ferroeléctricos utilizados hasta hoy. La presencia de una polarización espontánea en estas fases fluidas biestables es la base de las aplicaciones de los CLF.

Cuando el mesógeno portador de centros quirales es discótico (CL basados en moléculas discoides constituidas por un core plano extendido y polarizable y cadenas alifáticas periféricas), los apilamientos columnares resultantes también pueden alternar entre 2 estados biestables de alta polarización, aunque los tiempos de respuesta son mucho mayores (ms vs.  $\mu$ s), debido a la rigidez y extensión de los cores planos. Los alcoxibenzoatos bimetálicos pueden aportar a la solución de este inconveniente: exhiben también fases CL columnares, pero la estructura del core presenta mayor flexibilidad (mayores posibilidades de ángulos de torsión).

Se describen aquí los primeros pasos de esta estrategia, utilizando carboxilatos de rodio en que las cadenas alifáticas quirales corresponden a alcoxibenzoatos di- y trisustituídos.

**F18**

**ESTRUCTURAS CRISTALINAS: HERRAMIENTA PARA INTERPRETAR LA ARQUITECTURA DE FASES CL**

M. A. Castro<sup>1</sup>, Z. Chaia<sup>1</sup>, A. Zelcer<sup>1</sup>, M. Rusjan<sup>1</sup>, O. Piro<sup>2</sup>,  
E. E. Castellano<sup>3</sup> y F. D. Cukiernik<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>INQUIMAE-FCEN-UBA, <sup>2</sup>DF-FCE-UNLP/IFLP, <sup>3</sup>IFSC, U. Sao Paulo, <sup>4</sup>ICI-UNGS  
FCEN, Pabellón II, Cdad. Universitaria, C1428EHA, Buenos Aires, Argentina

E-mail: [macastro@qi.fcen.uba.ar](mailto:macastro@qi.fcen.uba.ar)

La estructura molecular y la arquitectura supramolecular de materiales en estado cristal líquido (CL) –información importante para entender sus propiedades- no pueden determinarse en forma precisa por métodos estructurales directos debido a la naturaleza desordenada de dichas fases. Los modelos que se proponen para estas mesofases se basan entonces en combinaciones de información macroestructural (DRX polvo, dilatometría, etc.) con la proveniente de sondas locales (espectroscopías, etc.) cuya variedad es particularmente amplia para CL que contienen metales de transición.

Un valioso elemento adicional de que se dispone en algunos casos es el conocimiento de la estructura cristalina del compuesto mesogénico en cuestión, o de análogos no mesogénicos. En esta comunicación se describe la estructura cristalina de un compuesto mesogénico de rutenio y de un compuesto no mesogénico de rodio. Los parámetros estructurales del primero,  $Ru_2(O_2C(CH_2)_8CH_3)_4(O_3SC_8H_{15})$ , permiten interpretar algunas características estructurales de la fase CL columnar hexagonal que presenta la serie homóloga  $Ru_2(O_2C(CH_2)_{n-2}CH_3)_4(O_3SC_8H_{15})$ , a  $T > 160 - 190^\circ C$ . La estructura del segundo, un bis-aducto de pirazina (pz) de fórmula  $Rh_2(O_2CC_6H_2(OC_2H_5)_3)_4pz_2$ , validan algunos aspectos del modelo propuesto para las fases CL columnares exhibidas por la serie polimérica  $[Rh_2(O_2CC_6H_2(OC_nH_{2n-1})_3)_4pz]_n$ .

F19

**REDES DE ELASTOMEROS MESOMORFOS BASADOS EN TRIFENILENOS: SINTESIS, CARACTERIZACION Y PROPIEDADES CL DE MONOMEROS FUNCIONALIZADOS**

**A. Zelcer\*, B. Donnio<sup>#</sup>, F. D. Cukiernik\*<sup>&</sup> y D. Guillon<sup>#</sup>**

**\*INQUIMAE-FCEN-UBA (Arg); <sup>#</sup>GMO-IPCMS (Francia); <sup>&</sup>ICI-UNGS (Arg)  
FCEN, Pabellón II, Cdad. Universitaria, C1428EHA, Buenos Aires, Argentina**

**E-mail: [zelcer@qi.fcen.uba.ar](mailto:zelcer@qi.fcen.uba.ar)**

Los trifenilenos sustituidos (TF) constituyen una interesante clase de materiales capaces de autoorganizarse en películas LB o en fases cristal líquido (CL) columnares, transportar electrones o energía a lo largo de las columnas, exhibiendo incluso fotoconductividad. Varias de estas propiedades están moduladas por el tipo de sustituyentes.

La presencia de fases CL facilita, en principio, su procesabilidad y orientación macroscópica, pero disminuye la conductividad debido a las fluctuaciones de posición inherentes al orden CL. Para remontar esta pérdida, buscamos reforzar el ordenamiento intermolecular incorporando los TF en sistemas poliméricos reticulados: por funcionalización selectiva de 2 ó 3 de las 6 posiciones del TF, seguida de polimerización con siloxanos, se espera obtener polímeros en que el grupo TF está incorporado a la cadena principal, con tasas de reticulación variables. Los elastómeros resultantes deberían presentar columnas ordenadas perpendicularmente a la dirección de tensión.

Se presentan en esta comunicación la síntesis, caracterización y estudio de las propiedades CL de algunos TF monoméricos hexasustituidos (con cadenas alifáticas terminadas en dobles enlaces o en oligosiloxanos), precursores de las redes elastoméricas.

F20

**Polarizabilidades Iónicas a Altas Presiones: Estudio en Sólidos Más Complejos**

**A. Batana, M.C. Monard(\*) y J.A.O. Bruno**

**Dpto. Oca. Inorg., Anal. y Oca. Física, FCEN-UBA, Pabellon 2, Ciudad Univ., 1428 Buenos Aires (Argentina); (\*) ICMC, Universidad de São Paulo, CP 668, 13560-970,**

**São Carlos, SP, Brasil** e-mail: [batana@qi.fcen.uba.ar](mailto:batana@qi.fcen.uba.ar)

Los estudios de cristales iónicos a altas presiones se ven dificultados en materiales cada vez más complejos. Por un lado los cálculos ab initio presentan limitaciones de tiempo y costo computacional al tener que repetir evaluaciones a diferentes presiones en sistemas complejos, por otro lado los modelos empíricos que propusimos previamente deben ser adaptados ya que no siempre se cuenta con información experimental suficiente aún a  $p=0$ .

Estos aspectos son los que discutiremos en este trabajo. Proponemos además una nueva forma de evaluación de  $\partial\alpha / \partial p$  (contribución aniónica) basada en la extensión para sistemas complejos de resultados provenientes del uso de dos modelos empíricos (exponencial e inverso) que aproximan bien los valores ab initio en sistemas sencillos.

Desarrollamos un programa computacional en MAPLE que por ser interactivo permite llevar a cabo estos estudios comparativos en forma más eficiente.

Los resultados muestran: 1)  $|\partial\alpha / \partial p|$  obtenidos con la nueva metodología da valores algo menores que los experimentales; 2) el modelo empírico propuesto anteriormente y adaptado a sólidos complejos da valores  $|\partial\alpha / \partial p|$  mayores que los experimentales.

De 1) y 2) podemos evaluar cotas inferior y superior de  $|\partial\alpha / \partial p|$ , de utilidad cuando no se cuenta con datos experimentales a altas presiones. Estudiamos NaCN, KCN, NaClO<sub>3</sub>, NaBrO<sub>3</sub> y haluros de NH<sub>4</sub><sup>+</sup>; se discuten los resultados de diferentes modelos.

F21

**ESTUDIO DE LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA DEL  
CsCuCl<sub>3</sub>, PURO Y DOPADO**

**Gabriela M. Lescano, María Rosa Prat, Aurora E. Sagua y Julio C. Bazán<sup>(1)</sup>.**  
**Lab. de Fisicoquímica Inorgánica- Dpto. de Qca. -Universidad Nacional del Sur**  
**Avda. Alem 1253- 8000 Bahía Blanca.**  
**E-mail: jcbazan@criba.edu.ar**  
**(1) Investigador Principal CIC.**

Se estudiaron las características conductoras del CsCuCl<sub>3</sub>. Se estableció que dicho compuesto presenta una conductividad total similar a la del CsCu<sub>2</sub>Cl<sub>3</sub> sintetizado en nuestro laboratorio y recientemente indexado. La misma se midió utilizando la técnica de Impedancia Compleja, utilizando electrodos de cobre metálico. El agregado de  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> en una concentración de 40 % en moles aumentó en un orden el valor de la conductividad total del material original. El estudio de la conductividad electrónica, por el método de polarización de Wagner, dio como resultado una baja conductividad electrónica debido a huecos.

El material estudiado se caracterizó, antes y después de las medidas eléctricas, a través de Rayos X y Análisis Térmico Diferencial. Los resultados de estos análisis evidencian que, en el electrolito en estudio, el Cu<sup>2+</sup>, en presencia de cobre metálico, sufriría la reducción a Cu<sup>+</sup>.

F22

**DIFUSION DE IONES PLATA EN UN VIDRIO SÓDICO  
¿CONTRIBUCIÓN DE UNA REACCIÓN QUÍMICA?**

**J.C. Bazán<sup>1,2</sup>, C.V. Janyistabro<sup>1</sup>, M.E. Sola<sup>1</sup>**

**<sup>1</sup>Laboratorio de Fisicoquímica Inorgánica, Dpto. de Química, Universidad Nacional del Sur, Avda. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina.**

**<sup>2</sup> Investigador C.I.C, Provincia Buenos Aires.**

**e-mail: mesola@criba.edu.ar**

La incorporación de cationes de mayor tamaño en la estructura del vidrio, reemplazando iones sodio por iones plata, produce un aumento en la resistencia mecánica del mismo. Se estudió la incorporación de iones plata en un vidrio sódico por intercambio iónico con una sal fundida, poniéndose a punto un método para cuantificar la plata incorporada, y la difusión de los mismos por un método electroquímico aplicando escalones de potencial a la celda:

ánodo- Ag<sub>(s)</sub>/AgI<sub>(s)</sub>/vidrio<sub>(s)</sub>/ AgI<sub>(s)</sub>/Pt<sub>(s)</sub> – cátodo

en la que el AgI funciona como electrolito filtro, ya que el catión plata es el único ion móvil a su través. Las curvas corriente-potencial mostraron una corriente límite estacionaria. Considerando la parte transitoria del fenómeno se observó que la corriente no tiende a cero con el tiempo lo cual indicaría que el proceso no es puramente difusional. La única reacción química posible sería la liberación de la partícula difundiente de la estructura del vidrio. Se plantea, entonces, el uso del modelo de la capa de reacción a través del cual se obtuvieron resultados consistentes entre sí como coeficientes de difusión a distintas temperaturas del orden de 10<sup>-12</sup> cm<sup>2</sup> s<sup>-1</sup> y una energía de activación de 60.47 kJ mol<sup>-1</sup>. La constante de equilibrio para la reacción, aproximadamente igual a 10<sup>-4</sup>, permite estimar los parámetros cinéticos dando como resultado una constante de velocidad para la reacción directa de 10<sup>2</sup> y un valor superior en cuatro órdenes para la reacción inversa.

**F23**

**ESTUDIO DEL REFORMADO SECO DE METANO  
SOBRE CATALIZADORES Pd/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y Pd/ZrO<sub>2</sub>**

**Pablo Gastón Schulz<sup>a</sup>, Gloria Gonzalez<sup>b</sup>, Claudia Quincoces<sup>b</sup> y**

**Carlos Gigola<sup>a</sup>**

**"Planta Piloto de Ingeniería Química, Camino Carrindanga km 7, Bahía Blanca, <sup>b</sup>  
CINDECA, calle 47 No 257, La Plata.**

**e-mail : cgigola@plapiqui.edu.ar**

Se está investigando el comportamiento de catalizadores Pd/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y Pd/ZrO<sub>2</sub> en el reformado de metano con dióxido de carbono, como alternativa a los catalizadores Pt/ZrO<sub>2</sub>. Para Pd/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> se ha utilizado la técnica de impregnación húmeda con precursor organometálico con recargas para elevar la concentración metálica. El catalizador fue caracterizado por microscopía electrónica de transmisión (TEM), y por quimisorción de hidrógeno, recurriendo al método de la doble isoterma para determinar la dispersión metálica. A partir de los resultados de TEM se calcula la concentración perimetral de Pd, a la cual se intentará correlacionar con la actividad catalítica. Se pudo comprobar que el catalizador Pd/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es activo para el reformado seco. Una muestra, Pd(1%)/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, mostró una dispersión relativamente baja: 25%. Con esta se realizó un ensayo de actividad, a 900 K, con una mezcla CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>/He=14/14/28 en un reactor en flujo, y los productos fueron analizados por cromatografía gaseosa. Se observó una alta conversión inicial de dióxido, con una abrupta disminución que finalmente se estabilizó en un valor bajo. Este comportamiento no se observa según la bibliografía para Pt/ZrO<sub>2</sub>. Se preparan nuevos catalizadores Pd/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> con mayor dispersión. No se han obtenido aún muestras de Pd/ZrO<sub>2</sub> con una actividad inicial comparable a Pd/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, atribuible principalmente al severo pretratamiento del soporte o a sus características

**F24**

**PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL SISTEMA  
VÍTREO  $x\text{Ag}_2\text{O} \cdot (1-x)\text{V}_2\text{O}_5 \cdot 2\text{TeO}_2$**

**R.S.Pettigrosso, M.A. Frechero, M.Villar(\*) y R.A. Montani(\*\*)**

**Lab. Físicoquímica, Dpto. Química; Dpto. Ing. Química(\*)**

**Universidad Nacional de Sur, (8000) Bahía Blanca, Argentina**

**(\*\*)CIC, (\*) CONICET**

**rspettig@criba.edu.ar**

Estudios realizados en nuestro laboratorio revelan que la incorporación de distintas fracciones molares de óxido modificador Ag<sub>2</sub>O, al sistema vítreo conductor mixto de fórmula  $x\text{Ag}_2\text{O} \cdot (1-x)\text{V}_2\text{O}_5 \cdot 2\text{TeO}_2$  afecta las propiedades eléctricas del mismo de manera tal que una isoterma de conductividad en función de  $x$ , presenta un pronunciado mínimo de *ca.* cinco órdenes de magnitud. En el presente trabajo se informa acerca del comportamiento termodinámico del sistema, con vista a interpretar las medidas eléctricas desde una óptica estructural que conduzca a la formulación de un modelo de conducción eléctrica para este tipo de sistemas. Experimentalmente se observa una disminución de la temperatura de transición vítrea y de la temperatura de recristalización a medida que se incrementa  $x$ . Asimismo, las variaciones en el Cp entre el estado sólido y el líquido subenfriado obtenidas por DSC, se relacionan con la variación de entropía involucrada en dicha transición, manifestándose una discontinuidad en el rango de composiciones estudiado. La tendencia hacia una disminución de la entropía con el aumento de  $x$  -acotada a la región de conducción iónica- coincide con la calculada a partir de medidas de conductividad, por aplicación de la regla de Meyer-Neldel.

F25

### ALEACIONES Mg-Cu: ESTUDIO DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

R.Fracchia<sup>1</sup>, R.Hojvat<sup>2</sup>, M.R.Soriano<sup>3</sup>, M. Yu. Lavrentiev<sup>4</sup>, N.L.Allan<sup>4</sup> y G.D.Barrera<sup>5</sup>  
<sup>1</sup>DQLAQF, FCE y N, UBA; <sup>2</sup>IdEN, CAE, CNEA, <sup>3</sup>FRBA, UTN; <sup>4</sup>School of Chemistry, University of Bristol, U.K.; <sup>5</sup>Dpto de Qca, UNP San Juan Bosco, Comodoro Rivadavia.  
 e-mail: [mrs@secyt.frba.utn.edu.ar](mailto:mrs@secyt.frba.utn.edu.ar).

Este sistema presenta propiedades interesantes, y fue estudiado tanto desde el punto de vista experimental como utilizando algunos modelos semiempíricos. El estudio comprende el cálculo de la función de correlación de pares. Estos gráficos correspondientes a las distintas aleaciones dan las posiciones de los máximos coincidentes con los valores obtenidos experimentalmente. Simulamos el sólido, el líquido a altas temperaturas, y la fase amorfa a temperatura ambiente. La función de correlación de pares presenta los gráficos característicos para el sólido, el líquido y el amorfo. Trabajar con una serie de proporciones de Cu-Mg nos permite calcular  $\Delta G$ , graficar la energía libre y hacer comparaciones con datos experimentales. Para poder estudiar los cambios de fases construimos celdas mixtas, se parte de una celda construida de modo que una zona tiene la estructura de un sólido, y la otra la estructura de un líquido. Para el potencial de interacción usamos el EAM, un modelo muy utilizado para metales. En este modelo la energía total de los átomos es una funcional de la densidad electrónica total: la parte atractiva proviene de la inmersión del átomo en el "gas de electrones" de sus vecinos, y la repulsiva de corto alcance se parametriza para ajustar a datos experimentales. El programa utilizado genera configuraciones a través del movimiento aleatorio de las partículas, variación en el tamaño de la celda o el intercambio entre dos átomos distintos; y permite calcular propiedades termodinámicas como la entalpía y el potencial químico. Para abordar el problema hemos utilizado el método de Monte Carlo, simulando el metal con celdas de 256 átomos.

F26

### CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DEL SISTEMA VÍTREO $x\text{Ag}_2\text{O} \cdot (1-x) \text{V}_2\text{O}_5 \cdot 2\text{TeO}_2$

M.A. Frechero, O.V. Quinzani y R.A. Montani (CIC)  
 Labs. de Físicoquímica e Inorgánica, Dpto. Química,  
Universidad Nacional de Sur, (8000) Bahía Blanca, Argentina  
[frechero@uns.edu.ar](mailto:frechero@uns.edu.ar)

El efecto en la conductividad eléctrica de la incorporación de distintas fracciones molares de óxido modificador ( $\text{Ag}_2\text{O}$ ) a los sistemas vítreos  $x\text{Ag}_2\text{O} \cdot (1-x) \text{V}_2\text{O}_5 \cdot 2\text{TeO}_2$  y  $x\text{Ag}_2\text{O} \cdot (1-x)[0.5 \text{V}_2\text{O}_5 \cdot 0.5 \text{MoO}_3] \cdot 2\text{TeO}_2$  aparece, en una isoterma de conductividad en función de la composición ( $x$ ), presentando un pronunciado mínimo de alrededor de 5 ordenes de magnitud. En este trabajo se informa la contrapartida estructural que se genera por dicha incorporación con vistas a interpretar las medidas eléctricas. Para ello, se compararon los espectros de FTIR obtenidos para ambos sistemas como así también los patrones de difracción de rayos X. Los espectros de IR permitieron dividir a los sistemas en dos zonas de acuerdo a la fracción molar del óxido modificador. A bajas concentraciones ( $x < 0.5$ ) el óxido de molibdeno muestra una distribución homogénea en la matriz de  $\text{TeO}_2$  a diferencia del  $\text{V}_2\text{O}_5$ , mientras que el  $\text{Ag}_2\text{O}$  actúa a preferentemente cortando las cadenas de vanadio-vanadio. Cuando  $x > 0.5$ , aparecen cambios importantes en los espectros que indican un gradual incremento en la tendencia del sistema a presentar ordenamientos de mediano alcance. Esta idea es reforzada con la consideración de los patrones de difracción de rayos X. Efectivamente, con la presencia de  $\text{MoO}_3$  en el sistema, aparece un incremento en la línea de base del patrón de difracción que pueden ser interpretado considerando la existencia de microdominios.

F27

**CORRELACIÓN ENTRE PROPIEDADES ELÉCTRICAS Y ESTRUCTURALES DEL SISTEMA VÍTREO  $x\text{Li}_2\text{O} \cdot (1-x)\text{V}_2\text{O}_5 \cdot 2\text{TeO}_2$**

**M.A. Frechero, J. M. Sieben, P. Fidelibus, Saúl Condell y R.A. Montani (CIC)**

**Lab. Fisicoquímica, Dpto. Química, Universidad Nacional de Sur,  
(8000) Bahía Blanca, Argentina.**

[frechero@uns.edu.ar](mailto:frechero@uns.edu.ar)

En el sistema vítreo conductor mixto de fórmula  $x\text{Li}_2\text{O} \cdot (1-x)\text{V}_2\text{O}_5 \cdot 2\text{TeO}_2$ , las isotermas de conductividad eléctrica en función de la concentración del óxido modificador ( $\text{Li}_2\text{O}$ ), presentan un pronunciado mínimo de varios órdenes de magnitud en la región próxima a  $x=0.5$ . Este trabajo persiguió como objetivo fundamental estudiar la influencia de la estructura en la conducción eléctrica en este tipo de materiales que permitan cimentar la formulación de un modelo para la conducción.

Se usó espectroscopía FTIR y difracción de rayos X para interpretar las variaciones introducidas por el óxido modificador en el ordenamiento de corto alcance. Estas técnicas pusieron también en evidencia que el remplazo parcial de  $\text{V}_2\text{O}_5$  por  $\text{MoO}_3$  juega un rol importante como estabilizador de la matriz vítreo. Por otra parte, utilizando DSC se encontró que con el óxido de litio, la variación introducida en la matriz es menos significativa en comparación con la introducción del óxido de plata como óxido modificador (también informado en este congreso). De los datos calorimétricos se estimó la componente entrópica asociada a cada sistema y se la comparó con aquellas obtenidas por medidas de conductividad.

F28

**ESTUDIO DEL ESTADO SÓLIDO DE PSEUDOSPOLIMORFOS DE AZITROMICINA**

**S. Faudone, S. Cuffini, M. Rubio, C. Fernández, R. Badini, V. Dabbene, A. Karlsson  
CEPROCOR - Agencia Córdoba Ciencia.**

**\*Fac. de Ciencias Exactas Físicas y Naturales - Universidad Nacional de Córdoba.**

**E-mail: [scuffini@ceprocor.uncor.edu](mailto:scuffini@ceprocor.uncor.edu)**

La Azitromicina Dihidrato es un antibiótico de amplio espectro perteneciente a los macrólidos derivado de la Eritromicina y utilizado como principio activo (PA) para uso farmacéutico. La estructura cristalina es ortorrómbica de acuerdo a la reportada en literatura(1). Se estudiaron muestras recristalizadas en acetona (A), tolueno (A), etanol (B) y metanol (B) que presentan patrones de DRX diferentes. Se obtuvieron los patrones de DRX y los espectros de FTIR a temperatura ambiente y a distintas temperaturas observándose diferencias entre A y B. Los termogramas obtenidos por DSC-TG presentan diferencias que se podrían atribuir a un ordenamiento diferente de las moléculas de agua entre ambas muestras. Por Microscopía Óptica, se observó diferencias morfológicas significativas entre los cristales de A y B y se logra determinar características cristalinas que dan información sobre la velocidad de cristalización en los distintos solventes. Por las evidencias en el estado sólido obtenidas se determina que la muestra B resultaría un pseudopolimorfo de la Azitromicina (Monohidrato). Esta estructura cristalina se postula principalmente como un ordenamiento diferente de las moléculas de agua siendo el monohidrato muy higroscópico, por lo cual se hace imprescindible hacer un control del estado sólido en este tipo de materias primas de uso en la elaboración de medicamentos.

F29

**Estabilidad electroquímica de monocapas autoensambladas de alcanotiolatos sobre electrodos de Au(111), Ag(111) y Cu(111)**

O. Azzaroni<sup>1,†</sup>, M.E. Vela<sup>1</sup>, G. Andreasen<sup>1</sup>, P. Carro<sup>2</sup> and R.C. Salvarezza<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>INIFTA - Universidad Nacional de La Plata - CONICET - Argentina  
e-mail: azzaroni@inifta.unlp.edu.ar  
<sup>2</sup>Universidad de La Laguna - Tenerife - España

En el presente trabajo hemos estudiado la estabilidad electroquímica de monocapas autoensambladas de alcanotiolos bajo condiciones catódicas. Para tal fin se han utilizado como criterio de estabilidad los potenciales de electrodesorción de mencionadas monocapas. Los resultados derivados de curvas de polarización catódicas se han complementado con cálculos de funcional de densidad (DFT). Sobre la base de este estudio se ha podido concluir que las diferencias en la estabilidad electroquímica de monocapas autoensambladas sobre electrodos de Au(111), Ag(111) y Cu(111), no se deben solamente a las diferentes funciones trabajo de los sustratos, sino que se debe tener en cuenta además otros factores, tales como la energía de desorción del anión alcanotiolato y la energía de solvatación de la superficie metálica. Bajo este enfoque se ha podido explicar el comportamiento experimental observado en estos sistemas.

F30

**DISCUSIÓN DE UN MODELO NO ALEATORIO PARA DESCRIBIR LA RUPTURA DIELECTRICA EN SÓLIDOS**

C. De Michelis, M.C. Cordero, E.E. Mola y J.L. Vicente  
Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, INIFTA  
Casilla de Correo 314, (1900) La Plata  
E-mail: eemola@inifta.unlp.edu.ar

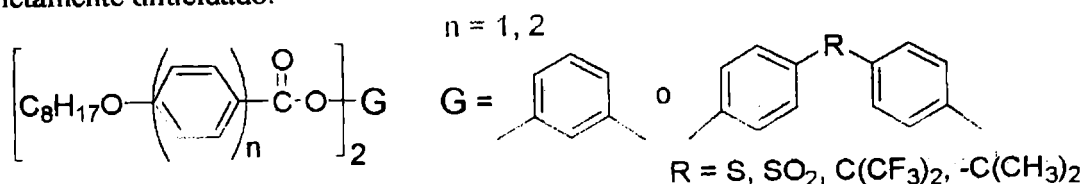
Se estudia un nuevo modelo de ruptura en dieléctricos sólidos sobre la base de huecos y canales de descarga. Dicho modelo puede emplearse en la descripción de las descargas eléctricas en resinas epoxy. A partir de dicho modelo, se observa que las estructuras fractales (árboles eléctricos) solo se producen cuando en las puntas de crecimiento se permite que los "campos" fluctúen alrededor de los correspondientes valores obtenidos al resolver la ecuación de Laplace. Tratando el factor de aumento del campo local como un ruido blanco generado por el mismo mecanismo de ruptura, encontramos que el grado de ramificación solo depende del rango de dicha fluctuación. Analizando la serie de tiempo obtenida a partir del número de descargas en función del tiempo, buscamos la existencia o no de un mecanismo de caos determinístico subyacente. Analizamos la dimensión fractal de los árboles junto a la de los atractores reconstruidos así como los exponentes de Lyapunov. Esto descartaría la presencia de un proceso estocástico aleatorio, elemento esencial de los modelos de ruptura dieléctrica empleados hasta el presente.

F 31

## SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CRISTALES LÍQUIDOS. DIESTERES ACODADOS

**Sandra A. Hernández, Pablo Del Rosso y Raúl O. Garay**  
**INIQUO. Universidad Nacional del Sur. Avenida Alem 1253. (8000) Bahía Blanca**  
**e-mail: shernand@criba.edu.ar**

La mayoría de los cristales líquidos termotrópicos sintetizados tienen una estructura lineal y hasta el presente sólo este tipo de cristales líquidos ha sido usado en aplicaciones tecnológicas. Los cristales líquidos con estructuras no convencionales que se apartan de la geometría lineal son importantes para el entendimiento teórico del fenómeno de la cristalinidad líquida, y además poseen potenciales nuevas aplicaciones. Recientemente se ha encontrado que sistemas de cristales líquidos acodados aquirales forman espontáneamente hélices en ordenamientos esmécticos. De la misma manera, ciertos ordenamientos de este tipo de mesógenos presentan un comportamiento ferroeléctrico cuyo origen no está completamente dilucidado.



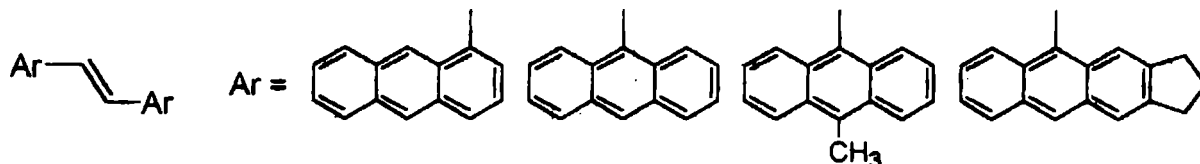
Este trabajo tuvo como objeto la síntesis y caracterización de las propiedades mesomórficas de una serie de diésteres acodados donde se varió la polaridad y movilidad conformacional del grupo central G y la longitud de los brazos laterales con el propósito de correlacionar dichos cambios con la estabilidad de la mesofase. Las propiedades mesomórficas de los diésteres fueron caracterizadas mediante microscopía óptica de luz polarizada y calorimetría diferencial de barrido.

F 32

## SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE DÍMEROS CON UNIDADES ANTRACÉNICAS

**Marcela F. Almassio, Rosana S. Montani y Raúl O. Garay**  
**INIQUO. Universidad Nacional del Sur. Avenida Alem 1253. (8000) Bahía Blanca**  
**e-mail: almassio@criba.edu.ar**

La posibilidad de una variación planificada de propiedades físicas a través de la síntesis es uno de los motivos principales del interés por el desarrollo de nuevos materiales orgánicos como elementos activos en dispositivos ópticos o electrónicos. Una característica estructural fundamental común a casi todos ellos es la presencia de sistemas electrónicos pi como elementos constitutivos. Así, tanto la estructura como el tipo de conexión entre dichas unidades pi determina el comportamiento final del material. La conexión mediante elementos saturados conduce a los sistemas denominados materiales o polímeros redox, donde la ausencia de interacción entre las unidades es la norma. Sin embargo, en los materiales conjugados la unión directa o mediante subunidades pi como el etileno puede conducir a grados variables de interacción entre las unidades cromofóricas o electrofóricas.



Este trabajo tuvo como objeto la síntesis y la caracterización de propiedades espectroscópicas (UV, fluorescencia) y electroquímicas (ciclo voltametría) de dimeros que incorporan la unidad estructural antraceno como cromóforo o electrofóforo. Se efectuó asimismo el modelado molecular de los dimeros. La respuesta depende de las características configuracionales y conformacionales de la conexión entre los grupos aromáticos.

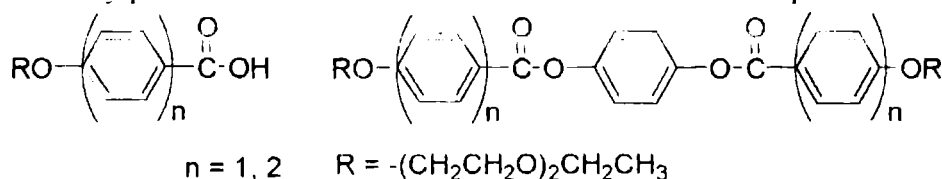
F 33

## SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CRISTALES LÍQUIDOS CON UNIDADES OXIETILÉNICAS

**Rosana S. Montani, Pablo Del Rosso, Sandra A. Hernández, Marcela F. Almasio y Raúl O. Garay**

**INIQQ. Universidad Nacional del Sur. Avenida Alem 1253. (8000) Bahía Blanca  
e-mail: smontani@criba.edu.ar**

Mientras que el orden orientacional propio de sistemas líquidos cristalinos termotrópicos depende de la anisometría molecular, su orden posicional puede ser una consecuencia tanto de fuerzas atractivas específicas como de la anfifilicidad molecular. Por ejemplo, mesógenos formados por segmentos rígidos aromáticos polares con cadenas terminales alifáticas apolares frecuentemente sufren microsegregación y dan lugar a mesofases esmécticas. Por otro lado, la sustitución de cadenas terminales apolares por cadenas oxietilénicas polares permite la introducción de interacciones específicas ión-dipolo mediante la disolución de compuestos iónicos, pero a la vez disminuye la anfifilicidad molecular y puede desestabilizar las mesofases en los sistemas puros.

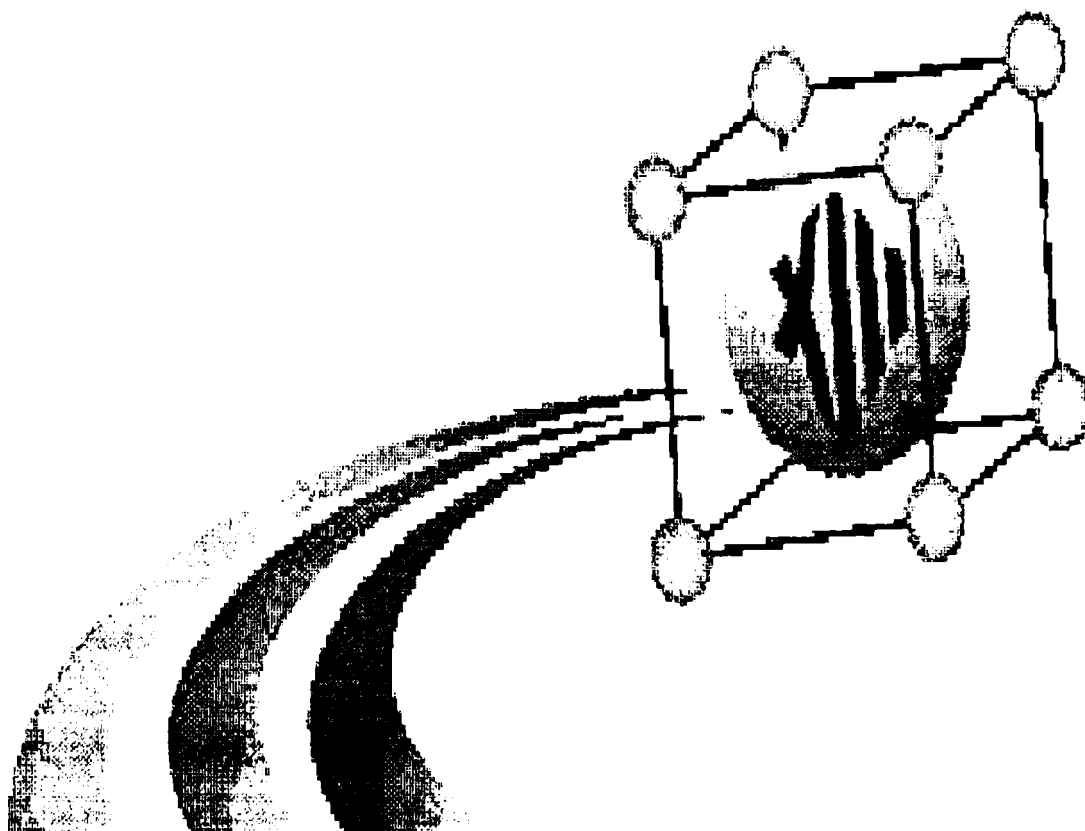


Este trabajo tuvo como objeto la síntesis y caracterización de las propiedades mesomórficas de una serie de ácidos y diésteres con cadenas oxietilénicas terminales con el fin de evaluar la influencia de la reducción de la anfifilicidad en las temperaturas de las transiciones térmicas de estos sistemas. Las propiedades mesomórficas fueron caracterizadas mediante microscopía de luz polarizada y calorimetría diferencial de barrido.



*SECCIÓN G*

*FISICOQUÍMICA  
GENERAL*



**XIII Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y Química Inorgánica.  
7 al 10 de Abril – 2003 - Bahía Blanca - Argentina**

## SECCIÓN G

| Sección y Número | TÍTULO   | AUTORES  | Modalidad |
|------------------|--|--|-----------|
| G1               | DISEÑO EXPERIMENTAL APLICADO A LA DECLORINACIÓN DEL PVC  | <u>Adelaida Ávila</u> , María Isela Gutiérrez, Eduardo I Sánchez   | Poster    |
| G2               | UTILIZACIÓN DE LAS TÉCNICAS CVAFS y AMA PARA LA CUANTIFICACIÓN DE Hg EN AGUAS INTERSTICIALES Y SEDIMENTOS                | <u>Ana J. Hocsman</u> <sup>1</sup> , Marcelo J. Avena <sup>1</sup> , Laurent Charlet <sup>2</sup>        | Poster    |
| G3               | <b>RETIRADO</b>  |  |           |
| G4               | EQUILIBRIOS DE FASES Y MEDIDAS DE EFECTO KERR EN MICROEMUSIONES DE POLIALQUILGLUCOSIDO                                   | E. Acosta, M. Ferrante, <u>B. Ginzberg</u>   | Poster    |
| G5               | ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN POLIETILENGLICOL ALBÚMINA SÉRICA EN SISTEMAS BIFÁSICOS ACUOSOS                                 | Beatriz Farruggia, Bibiana Nerli y <u>Guillermo Picó</u>   | Poster    |
| G6               | VARIACION DE LA TEMPERATURA DE TRANSICION VITREA EN FORMULACIONES SIMILARES A LAS UTILIZADAS EN CAMELOS CON EDULCORANTES | <u>CELEGHIN, Adelina G*</u> y <u>RUBIOLO, Amelia C**</u>   | Poster    |
| G7               | DISCRIMINACIÓN DE VINOS MALBEC POR MÉTODOS FÍSICOQUÍMICOS  | <u>Daniela Mizrahi</u> , Martín Negri.   | Poster    |
| G8               | DISCRIMINACION DE ACORDES PRESENTES EN UNA FRAGANCIA   | <u>Diana Zubiri</u> (1), Sergio Campana (2), Delia Bernik (1) y Martín Negri (1).                        | Poster    |
| G9               | ESTUDIO DE LA PROTONACION DE CALIXAMINAS CON ACIDO PERCLORICO EN METANOL, ETANOL Y BENZONITRILO                          | Angela F. DANIL de NAMOR <sup>1</sup> , Alberto R. CASAL <sup>2</sup> y <u>Elisabet GIL</u> <sup>3</sup> | Poster    |

|     |  |   |        |
|-----|--|---|--------|
| G10 | CICLO DIURNO DE AEROSOLES Y SU INFLUENCIA SOBRE EL FLUJO DE RADIACIÓN SOLAR ULTRAVIOLETA                       | Dardo LAZARTE <sup>(1,4)</sup> , Javier FOCHESTATTO <sup>(1)</sup> , Elian WOLFRAM <sup>(1,2)</sup> , Lidia OTERO <sup>(1,3)</sup> , Pablo RISTORI <sup>(5)</sup> y Eduardo QUEL <sup>(1)</sup> . | Poster |
| G11 | CARACTERIZACIÓN DEL MATERIAL PARTICULADO PROVENIENTE DEL VOLCÁN COPAHUE  | G. Polla <sup>1</sup> , A. Petragalli <sup>1</sup> , P. Smichowski <sup>2</sup> , D. Gómez <sup>2</sup>   | Poster |
| G12 | DETERMINACIÓN COMPARATIVA DEL VALOR ENERGÉTICO EN DIETAS DE AVES   | Matías F. Andrada, Juan C. Garro Martínez, A. Devia y G. N. Zamarbide   | Poster |
| G13 | DISPERSIÓN DE CO Y PARTICULAS EN CORREDORES VEHICULARES CON ALTA DENSIDAD DE TRÁNSITO                          | Horacio Bogo y Enrique San Román  | Poster |
| G14 | CARACTERÍSTICAS FÍSICOQUÍMICAS DE ABONOS ORGÁNICOS   | V. Palazzi; P. Domínguez; C. Stinco; L. Trejo y M. I. Sánchez de Pinto  | Poster |
| G15 | UTILIZACIÓN DE MAPAS AUTO-ORGANIZADOS PARA ANÁLISIS DE DATOS DE MONITOREO AMBIENTAL                            | J. Magallanes <sup>1,4</sup> , J. Zupan <sup>2</sup> , D. Gómez <sup>1,4</sup> , S. Reich <sup>3</sup> , L. Davidowski <sup>1</sup> , N. Groselj <sup>2</sup>                                     | Oral   |
| G16 | MÉTODO PARAMÉTRICO DE OPTIMIZACIÓN PARA LA DETERMINACIÓN DE As, Sb Y Bi POR ICP-AES CON GENERACIÓN DE HIDRUROS | Jorge F. Magallanes <sup>1,2</sup> , Julieta Marrero <sup>1</sup> y Patricia Smichowski <sup>1</sup>  | Poster |
| G17 | ADSORCIÓN DE ARSÉNICO (V) POR TRITURADOS DE LADRILLO   | Gil, Diego M.; Olea, Luis F.; Morán; Juana A. de  | Poster |
| G18 | MÉTODO ALTERNATIVO PARA LA DETERMINACIÓN DE ARSÉNICO EN AGUA   | K. Rondano, M Hernández Ubeda M Velasco <sup>1</sup> y C.E. López Pasquali  | Poster |

|     |   |   |        |
|-----|---|---|--------|
| G19 | UN MÉTODO SIMPLE PARA ESTIMAR LAS EMISIONES DE CO Y NO <sub>x</sub> DE FUENTES MÓVILES  | Luis E. Olcese y Beatriz M. Toselli   | Oral   |
| G20 | ESTUDIO CINÉTICO DE LA INTERACCIÓN DEL ÁCIDO D-GALACTURÓNICO (D-GAL.) CON CROMO HIPERVALENTE Y CARACTERIZACIÓN DE ESPECIES INTERMEDIARIAS DE REACCION | Juan González, Verónica Daier, Silvia García, Luis Sala y Sandra Signorella   | Oral   |
| G21 | ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES DEL CROMO CON SUSTRATOS DE INTERÉS BIOLÓGICO   | M. Frascaroli, M. Santoro, L. Ciullo, V. Roldán, S. García, A. Quiroga, V. Martínez, M. Álvarez, P. Manzi, V. Andreu, E. Caffaratti, A. Zucchetti, S. Signorella, L. Sala | Oral   |
| G22 | EFFECTO DE LAS SUSTANCIAS HÚMICAS EN LA ASOCIACIÓN DE UN COLORANTE TRIFENILMETANO   | Graciela Zanini†*, Marcelo Avena‡, Sarah Fiol† y Florencio Arce†  | Poster |
| G23 | ESTUDIOS PRELIMINARES DE LA CARBOCLORACIÓN DE Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>  | J. A. González, J. B. Rivarola y M. del C. Ruiz   | Poster |
| G24 | CLORACIÓN DE LA MEZCLA DE Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -In <sub>2</sub> O <sub>3</sub>  | F. Túnez, M. del C. Ruiz y J. A. González   | Poster |
| G25 | LIBERACION DE COMPUESTOS ENCAPSULADOS EN GELES DE PECTINAS  | María Eugenia Monge(1), Delia Bernik, Martín Eguaras* y Martín Negri  | Poster |
| G26 | ATG, DTA, IR y DRX DE HIDRATOS DE NITROPRUSIATO DEL NIQUEL (II)   | Francisco Molinari*, M. Inés Gómez* y Alba Benavente*   | Poster |
| G27 | EFFECTO DEL MEDIO SOBRE LA INTERACCIÓN DE ÉSTERES DE CALIXARENOS CON PICRATOS ALCALINOS.  | M. A. PUGLIESE <sup>1</sup> , M. T. GOITIA <sup>1</sup> , M. E. MONTERO <sup>1</sup> , A. R. CASAL <sup>1</sup> , A. F. DANIL DE NAMOR <sup>2</sup>                       | Poster |

|     |   |   |        |
|-----|---|---|--------|
| G28 | ESTUDIOS ESTRUCTURALES Y DE LIBERACIÓN DE DROGAS EN MATRICES DE BIOPOLÍMEROS  | Nora J. François <sup>(1)</sup> , Ana M. Rojas <sup>(2)</sup> , Marta E. Daraio <sup>(1)</sup> y Delia L. Bernik <sup>(3)</sup> | Poster |
| G29 | NATURALEZA DE LAS INTERACCIONES EN GELES OBTENIDOS POR COAGULACION ENZIMATICA DE LA LECHE A DOS TEMPERATURAS: 25 Y 38°C | Adriana Alessi <sup>a</sup> , Alicia Fontana <sup>a</sup> , Miryam S. Pires <sup>b</sup> y Carlos A. Gatti <sup>a</sup>         | Poster |
| G30 | APLICACIÓN DE LA ISOTERMA DE BET A LA SORCIÓN DE PETRÓLEO EN SUELOS - USO COMPARATIVO DE COMPUESTOS PUROS               | Rios S. M., Katusich O., Velasquez S. y Nudelman N. <sup>1</sup>  | Poster |
| G31 | ESTUDIO DE UN MÉTODO ALTERNATIVO PARA EL ANÁLISIS DE CARBONO EN CARBUROS DE METALES DE TRANSICIÓN                       | Ana Laura PAREJA VIÑAVEYA y Silvia Alejandra ALCONCHEL  | Poster |
| G32 | ESTUDIO ESPECTROFOTOMETRICO Y VOLTAMETRICO DE LA ESTABILIDAD DEL COMPLEJO Fe(II)-1,10-FENANTROLINA EN MEDIO ACIDO       | A.J. Ruggeri, N. Wilke, R.A. Iglesias y S.A. Dassie   | Poster |
| G33 | LLE: SISTEMA CUATERNARIO CICLOHEXANO-BENCENO-ETANOL-AGUA  | Mónica Gramajo de Doz, Carlos Bonatti y Horacio Sólimo  | Poster |
| G34 | LLE: SISTEMA CUATERNARIO CICLOHEXANO-BENCENO-METANOL-AGUA   | Mónica Gramajo de Doz, Carlos Bonatti y Horacio Sólimo  | Poster |
| G35 | CARACTERIZACIÓN DEL COMPLEJO 1:2 FORMADO POR AlCl <sub>3</sub> y 5,7-DIHIROXIFLAVONA. EFECTO SOLVENTE                   | G. T. Castro, S. L. Arce, E. I. Gasull, S. E. Blanco.   | Poster |
| G36 | DIFERENCIACION DE DILUCIONES DE ALCOHOLES ALIFATICOS Y FENOL EN AGUA MEDIANTE UNA NARIZ ELECTRÓNICA                     | Virginia Emilse Diz <sup>(1)</sup> , Miryam Cassanello <sup>(2)</sup> y Martín Negri <sup>(1)</sup>                             | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| G37 | NUEVO SISTEMA LIDAR PARA LA MEDICIÓN DE OZONO Y VAPOR DE AGUA ATMOSFÉRICOS EN EL CEILAP                 | Elian WOLFRAM <sup>(1)</sup> ,<br>Andrea PAZMIÑO <sup>(1)</sup> ,<br>Dardo LAZARTE <sup>(1,4)</sup> ,<br>Juan C.<br>DWORNICZAK <sup>(1)</sup> ,<br>Javier FOCHESTATTO <sup>(1)</sup> ,<br>Jacques.<br>PORTENEUVE <sup>(3)</sup> y<br>Eduardo QUEL <sup>(1)</sup> | Poster |
| G38 | FUENTE PULSADA Y SENSOR DE IONIZACIÓN PARA LA GENERACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UN HAZ MOLECULAR PULSADO. | A. Carrera <sup>1</sup> , G. Moriena <sup>1</sup> ,<br>R. Fernández Prini <sup>1,2</sup> , E.<br><u>Marceca</u> <sup>1</sup>   | Oral   |
| G39 | FORMACION DE ESTRUCTURAS ESPACIO - TEMPORALES EN REACTORES QUIMICOS                                     | Marcelo Kuperman   | Poster |

G 1

### DISEÑO EXPERIMENTAL APLICADO A LA DECLORINACIÓN DEL PVC

**Adelaida Ávila, María Isela Gutiérrez, Eduardo I. Sánchez**  
**Facultad de Ciencias Naturales. Universidad Nacional de la Patagonia S. J. B.**  
**Comodoro Rivadavia**  
**E-mail: aavila@unpata.edu.ar**

Los experimentos estadísticamente diseñados consisten en una serie de ensayos planeados de tal manera que permitan predecir la combinación óptima de variables para obtener una respuesta máxima.

Desde hace algunos años nuestro interés se ha centrado en el estudio de la degradación térmica y fotoquímica del policloruro de vinilo (PVC). Hemos observado que varios factores influyen la declorinación del PVC empleando sistemas solvantes. El objetivo de este trabajo se ha centrado en el estudio de tres de estos factores: temperatura, agitación y luz. A efectos de optimizar el proceso de declorinación, analizar si alguno de estos factores es determinante en el rendimiento de la reacción y analizar la interacción entre los mismos se decidió emplear un diseño factorial  $N^k$ , siendo  $N=2$  el número de niveles y  $k=3$ , el número de factores, consistente de ocho experimentos. Se emplearon variables codificadas, considerando los siguientes niveles de cada uno de estos factores: temperatura (ambiente y calentamiento a reflujo), agitación (presencia y ausencia), luz (presencia y ausencia). La respuesta analizada fue el porcentaje de cloro extraído. Ninguno de los factores estudiados tiene una influencia significativa. Los valores negativos obtenidos para los factores de agitación y luz sugieren que a la temperatura de reflujo es conveniente trabajar en ausencia de ambos.

G 2

### UTILIZACIÓN DE LAS TÉCNICAS CVAFS y AMA PARA LA CUANTIFICACIÓN DE Hg EN AGUAS INTERSTICIALES Y SEDIMENTOS

**Ana J. Hoczman<sup>1</sup>, Marcelo J. Avena<sup>1</sup>, Laurent Charlet<sup>2</sup>**

**<sup>1</sup>INFIQC, Dpto. Físicoquímica, Fac. Ciencias Químicas. Universidad Nacional de Córdoba. 5000, Córdoba, Argentina. <sup>2</sup>LGIT, Université J. Fourier, Grenoble, Francia.**

**e-mail: ahoczman@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

El mercurio (Hg) es un elemento altamente tóxico siendo las industrias productoras de soda cáustica y las actividades de explotación de oro las principales fuentes de contaminación. El ciclo biogeoquímico del Hg es muy complejo, con intercambios permanentes entre la atmósfera, hidrosfera y biosfera. El Hg se encuentra en estos medios bajo diferentes formas: metálica Hg, iónica Hg (II), orgánica R-Hg<sup>+</sup> o R-Hg-R. Una vez presente en los cursos de agua, se deposita en los sedimentos donde es transformado en metilmercurio, forma orgánica muy tóxica. Es muy importante poder cuantificar la forma iónica Hg<sup>2+</sup> porque bajo esta forma se acumula principalmente en los suelos, sedimentos y en medios acuosos naturales.

En este trabajo se determina la concentración de Hg en aguas y suelos, mostrando la metodología de cuantificación, tratamiento a seguir de las muestras y descripción del equipo

Los mediciones se llevaron a cabo mediante CVAFS (Cold Vapour Atomic Fluorescence Spectrometry). Esta es una técnica muy sensible con la que es posible medir concentraciones de mercurio en el orden de los picogramos. Mediante la misma se analizaron aguas intersticiales extraídas con diferentes técnicas, con el fin de obtener los perfiles de concentración de mercurio para aguas contaminadas y no contaminadas. Los mismos tipos de perfiles fueron realizados para muestras sólidas de suelo mediante AMA (Analizador de Mercurio por Absorción Atómica).

**G 3 RETIRADO**

**G 4**

**EQUILIBRIOS DE FASES Y MEDIDAS DE EFECTO KERR  
EN MICROEMUSIONES DE POLIALQUILGLUCOSIDO**

**E.Acosta, M.Ferrante, B.Ginzberg**

**Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Paseo Colon 850 (1063), Buenos Aires, Argentina , e-mail: [bginzbe@fi.uba.ar](mailto:bginzbe@fi.uba.ar)**

La síntesis de surfactantes a partir de sustancias renovables es el resultado de necesidades actuales y del requerimiento de diversos organismos ecológicos mundiales que puntualizan las siguientes propiedades para los surfactantes: bajo impacto ambiental y alta biodegradabilidad; empleo de recursos renovables para evitar los derivados del petróleo; buena relación costo eficiencia, buenas propiedades dermatológicas y de atoxicidad.

Los polialquilglucósidos (APG) son una nueva clase de surfactantes no iónicos (obtenidos a partir de azúcares) cuya parte hidrofóbica es una cadena alquídica de  $m$  átomos de carbonos unida a  $n$  unidades de glucosa que conforman la parte hidrofílica de la molécula. Dado el carácter hidrofílico de estos compuestos el agregado de cosurfactantes (alcoholes) permite la espontánea emulsificación de sistemas agua-aceite. En este trabajo se han determinado los equilibrios de fases de un sistema cuaternario formado por octano, agua, poli (C8/C10) glucósido y octanol. El efecto de la variación de la concentración del cosurfactante y de la temperatura en las estructuras de los agregados se ha indicado en los diagramas de fases obtenidos a 25°C y a 50°C. Estos diagramas presentan la forma de un "pez" y poca variación con la temperatura. Se ha medido la constante Kerr, el tiempo de relajación de la birrefringencia y la dispersión de luz para microemulsiones inferiores, medias y superiores obtenidas a partir de estos diagramas.

G 5

## ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN POLIETILENGLICOL ALBUMINA SERICA EN SISTEMAS BIFASICOS ACUOSOS

Beatriz Farruggia, Bibiana Nerli y Guillermo Picó

Depto. de Química Física. Área Fisicoquímica. Facultad de Cs. Bioquímicas y Farmacéuticas. U. N. Rosario. Suipacha 570 (2000) Rosario. [gpico@fbioyf.unr.edu.ar](mailto:gpico@fbioyf.unr.edu.ar)

En los últimos años los sistemas bifásicos acuosos (SBA) han adquirido importancia como herramienta de la Biotecnología en el aislamiento y concentración de proteínas provenientes de algún producto natural o de la expresión en microorganismos. El coeficiente de reparto ( $K_r$ ) de proteínas en SBA formados por polietilenglicol (PEG) y fosfato de potasio depende significativamente de la temperatura, fuerza iónica del medio, sales, superficie hidrofóbica de la proteína, pH, concentración de polímero de cadena flexible, etc.

El objetivo de este trabajo es lograr una descripción de la naturaleza de la interacción entre la albúmina sérica bovina (BSA) y el PEG que permita comprender las fuerzas que gobiernan este fenómeno y por ende diseñar un modelo para predecir la conducta de reparto de otras proteínas

Se midió el  $K_r$  de BSA en SBA formados por fosfato de potasio y PEG de diferentes pesos moleculares (desde 600 a 3350). La interacción BSA-PEG se estudió mediante difracción circular, dispersión dinámica y estática de la luz, fluorescencia, desnaturalización química de la proteína, anisotropía de la fluorescencia y calorimetría isotérmica.

Los resultados muestran que la interacción de BSA con PEGs de bajo peso molecular es endotérmica con un segundo coeficiente del virial positivo y de gran magnitud. Asimismo se observó un importante cambio del contenido de alfa hélice de la proteína en presencia de estos PEGs así como un aumento de su estabilidad termodinámica. El aumento del peso molecular del PEG está asociado a valores menores tanto de la variación entálpica como del segundo coeficiente de virial sugiriendo una interacción menos significativa que en el caso anterior.

Se puede concluir que existe una interacción específica entre la BSA y los PEGs de bajo peso molecular mientras que los de mayor peso molecular se dispondrían como una atmósfera más laxa alrededor de la proteína. Este comportamiento actúa como un factor decisivo en los equilibrios de reparto ( $K_r$ ) de las proteínas en los SBA.

G 6

## VARIACION DE LA TEMPERATURA DE TRANSICION VITREA EN FORMULACIONES SIMILARES A LAS UTILIZADAS EN CAMELOS CON EDULCORANTES

CELEGHIN, Adelina G\* y RUBIOLO, Amelia C\*\*

\*Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas – Paraje el Pozo

Santa Fe (Argentina) Tel 0342-4575206. E mail: [celeghin@intec.unl.edu.ar](mailto:celeghin@intec.unl.edu.ar)

\*\*Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química – Güemes 3450 Santa Fe (Argentina) Tel 0342-4559174 – Fax 4550944 –

E mail: [arubiolo@intec.unl.edu.ar](mailto:arubiolo@intec.unl.edu.ar)

En la fabricación de caramelos duros la sacarosa y el jarabe de glucosa actúan como humectante, texturizante, espesante y conservante. Suele reemplazarse empleando simultáneamente dos o más tipos de edulcorantes. La isomaltosa con el jarabe de maltitol constituyen un sistema de edulcorantes empleado como sustituyentes para alcanzar un balance entre dulzura, cristalización y acariogenicidad, que retiene las propiedades plastificantes de importancia en productos pobres en azúcar. Los productos libres de azúcar son más higroscópicos y en consecuencia menos estables durante el almacenamiento. La variación se produce en la mayoría de los sistemas azucarados dado que se encuentran en estado amorfo. El cambio de estado que ocurre con disminución de la viscosidad y aumento de la movilidad molecular al aumentar la temperatura y/o variar la composición, se relaciona con la transición vítrea ( $T_g$ ). Esta temperatura indica el comienzo de los mecanismos de deterioro y un parámetro fisicoquímico útil para predecir la estabilidad física de los mismos. La  $T_g$  se caracteriza por un cambio en la capacidad calorífica, lo que permite determinarla por calorimetría diferencial de barrido (DSC). La misma es función de la composición, masa molar, contenido de humedad y temperatura ambiente. El objetivo de este estudio es conocer el efecto de la temperatura, del tiempo, la humedad y la maltodextrina en mezclas de isomaltosa y jarabe de maltitol en formulaciones de sistemas azucarados similares a caramelos. Las matrices en estado vítreo de las muestras con diferente composición fueron congeladas en aire líquido y liofilizadas 72 horas a temperatura ambiente. Se determinó la  $T_g$  con un DSC METTLER TOLEDO (Greifensee, Suiza). La presencia de maltodextrina contribuyó a aumentar la diferencia entre la temperatura ambiente y la  $T_g$ , lo que indica que la velocidad de cristalización del producto disminuye y prolonga su estabilidad.

G 7

## DISCRIMINACIÓN DE VINOS MALBEC POR MÉTODOS FÍSICOQUÍMICOS

**Daniela Mizrahi, Martín Negri.**

**Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física.  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.  
Pabellón II, 1<sup>er</sup> piso, Ciudad Universitaria, C1428EHA. Buenos Aires, Argentina.  
E-mail: dmizrahi@qi.fcen.uba.ar**

Se discriminaron distintos vinos argentinos de tipo Malbec empleando principalmente un dispositivo de nariz electrónica. Dicho dispositivo consiste en un arreglo de sensores de gases inespecíficos de modo que el conjunto de las señales obtenidas constituye un patrón característico del aroma de la muestra.

Se ensayaron muestras por quintuplicado de cuatro vinos, tres de origen comercial y uno de elaboración artesanal (cosechas 2000 y 2001). Se obtuvieron huellas digitales diferentes en cada caso inmediatamente luego de abierta la botella, lo cual permite la discriminación de los diferentes vinos. En forma complementaria se realizó un análisis multivariado de Componentes Principales, que posibilitó una mejor discriminación sobre una base estadística. De esta forma es posible determinar a que bodega corresponde una dada muestra de un vino Malbec.

Los resultados obtenidos muestran que la huella digital de cada vino sufre modificaciones en función del tiempo, a partir del día en que se abre una botella, indicando que se produce un cambio en el aroma del vino con el correr de los días.

Finalmente se completó el análisis multivariado incluyendo datos provenientes de mediciones espectroscópicas (FTIR y visible) y de parámetros fisicoquímicos (por ej. conductividad eléctrica).

G 8

## DISCRIMINACION DE ACORDES PRESENTES EN UNA FRAGANCIA

**Diana Zubiri(1), Sergio Campana (2),  
Delia Bernik (1) y Martín Negri (1).**

**(1) Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.  
Pabellón II, 1<sup>er</sup> piso, Ciudad Universitaria, C1428EHA. Buenos Aires, Argentina.**

**(2) Open Automation SRL. Rosario. Argentina.**

**E-mail: dzubiri@qi.fcen.uba.ar**

Se logró la discriminación entre los aromas provenientes de una serie de acordes de perfumería fina (sistemas compuestos por gran número de compuestos volátiles), que se combinan para obtener un producto final (perfume) de olor característico. Los diversos acordes y el perfume fueron provistos por International Flavors & Fragrances. La discriminación de los olores se realizó empleando un equipo de nariz electrónica desarrollado en el laboratorio. El sistema de adquisición de datos y el análisis multivariado, empleando Componentes Principales, fue optimizado, logrando reducir significativamente los tiempos de análisis.

El sistema permitió la discriminación de los distintos acordes entre sí. Se verificó, también mediante Análisis de Componentes Principales, que el agregado de pequeñas cantidades de etanol en acordes de base oleosa produce un cambio continuo en el olor resultante. De esa forma se logró modificar el patrón de olor de los acordes hasta obtener patrones similares a los correspondientes acordes en base alcohólica.

G 9

**ESTUDIO DE LA PROTONACION DE CALIXAMINAS CON  
ACIDO PERCLORICO EN METANOL, ETANOL Y  
BENZONITRILO**

Angela F. DANIL de NAMOR<sup>1</sup> Alberto R. CASAL<sup>2</sup> y Elisabet GIL<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Laboratory of Thermochemistry, Department of Chemistry, University of Surrey,  
Guildford, Surrey, GU2 5XH, UK

<sup>2</sup> Laboratorio de Química Analítica, Departamento de Química, Universidad Nacional  
del Sur, Bahía Blanca, 8000. R. ARGENTINA

Laboratorio de Fisicoquímica, Departamento de Química, Universidad Nacional del  
Sur, Bahía Blanca, 8000. R. ARGENTINA EMAIL: egil@criba.edu.ar

<sup>3</sup> Laboratorio de Fisicoquímica, Departamento de Química, Universidad Nacional del  
Sur, Bahía Blanca, 8000. R. ARGENTINA EMAIL: egil@criba.edu.ar

Las calixaminas se obtienen por funcionalización del borde inferior de los calixarenos sustituyendo el hidrógeno fenólico por aminas terciarias alifáticas o alicíclicas. Entre las características más significativas de estos macrociclos se destaca su habilidad para formar complejos con numerosos iones. En el presente trabajo se utilizan los derivados dimetilamina, dietilamina y diisopropilaminoxido del *p-tert*-butil calix[4]areno. Se estudia la interacción de estos O-aminocalixarenos con ácido perclórico en metanol, etanol y benzonitrilo a través de mediciones conductimétricas, análisis espectroscópicos y experiencias de extracción. Las evidencias resultantes llevan a una interpretación de la naturaleza del complejo formado por la interacción del aminocalixareno con el ácido.

G 10

**CICLO DIURNO DE AEROSOLES Y SU INFLUENCIA  
SOBRE EL FLUJO DE RADIACIÓN SOLAR  
ULTRAVIOLETA**

Dardo LAZARTE<sup>(1,4)</sup>, Javier FOCHE SATTO<sup>(1)</sup>, Elian WOLFRAM<sup>(1,2)</sup>, Lidia OTERO<sup>(1,3)</sup>,  
Pablo RISTORI<sup>(5)</sup> y Eduardo QUEL<sup>(1)</sup>.

<sup>1</sup> CEILAP (CITEFA-CONICET). San Juan Bautista de la Salle 4397.B1603ALO. VILLA  
MARTELLI

<sup>2</sup> Becario CONICET - <sup>3</sup> Becaria CONAE - <sup>4</sup> Universidad Nacional de General San Martín

<sup>5</sup> Laboratoire de Pollution de l'Air et du Sol, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse  
E-MAIL: foch@citefa.gov.ar

Se describe la influencia del ciclo diurno de los aerosoles troposféricos sobre el flujo de radiación solar incidente. Se presenta un caso de estudio en función del forzamiento de la dinámica de la capa límite atmosférica. Se utilizaron datos de observación de la radiación solar y de aerosoles atmosféricos tomados por la red AERONET de NASA, para la medición de espesor óptico de aerosoles y por la red Solar UV del CONICET. El flujo de radiación solar incidente en la superficie de la Tierra se midió con un instrumento GUV y los parámetros de los aerosoles atmosféricos se obtuvieron mediante mediciones con un fotómetro solar multispectral. En este contexto, se registraron diversos escenarios dinámicos con diferente carga de aerosoles en CEILAP. El análisis de la influencia de la distribución de tamaños de los aerosoles submicrométricos en el flujo UV solar incidente se realizó utilizando el cálculo de la distribución de tamaños y se inicializó un código de transferencia radiativa (TUV) con los parámetros derivados de la medición de aerosoles. El cálculo de la distribución de tamaños se basó en las mediciones del fotómetro solar y la utilización de un código de Mie. Finalmente se presenta un análisis de comparativo entre la radiación ultravioleta medida y simulada en las condiciones de variación dinámica de la carga de aerosoles y se discuten los resultados.

G 11

**CARACTERIZACIÓN DEL MATERIAL PARTICULADO  
PROVENIENTE DEL VOLCÁN COPAHUE**

**G.Polla<sup>1</sup>, A.Petragalli<sup>1</sup>, P. Smichowski<sup>2</sup>, D.Gómez<sup>2</sup>**

**C.A.C. - Comisión Nacional de Energía Atómica**

**Av.Gral Paz 1499 – 1650 San Martín – Buenos Aires - Argentina**

**E-mail: [grispoll@cnea.gov.ar](mailto:grispoll@cnea.gov.ar)**

Este trabajo presenta un estudio de identificación y caracterización de cenizas volcánicas provenientes de la erupción magmática del Volcán Copahue, provincia de Neuquén, (Argentina) ocurrida en julio de 2001. El material particulado fue tomado de las cenizas depositadas a 10 km del cráter, en un sitio cercano a la población de Caviahue. Las muestras fueron clasificadas de acuerdo al tamaño de partícula, para estudiar la distribución de metales/metaloideos y compuestos químicos presentes y correlacionarlas con el tamaño de grano. Las cuatro fracciones obtenidas, A (diámetro,  $d < 36 \mu\text{m}$ ), B ( $36 < d < 45 \mu\text{m}$ ), C ( $45 < d < 150 \mu\text{m}$ ) y D ( $150 < d < 300 \mu\text{m}$ ), fueron analizadas por microscopía electrónica de barrido, espectrometría de energía dispersiva y difrac. de rayos X. Los elementos presentes en mayor concentración en el total del material particulado fueron Si, Fe, Al, S, Ca, Ti, Cu, Mg, Na, Zn y Au. Su distribución no fue homogénea, sino que se observaron variaciones en función del tamaño de partícula: El silicio se encuentra como elemento mayoritario en la fracción A, mientras que Al, Fe y Ca se encuentran en concentraciones similares y tres a cuatro veces inferiores a las del Si. La concentración de Ti decrece mientras que la de los elementos formadores de roca (Na, Mg, Cu y Zn) aumenta a medida que aumenta el tamaño de grano. Existen diferencias significativas entre los macrocomponentes característicos de las cuatro muestras: en la fracción A, el óxido dominante es  $\text{SiO}_2$ , como cuarzo, tridimita, cristobalita y opal. En las fracciones de tamaño de partícula mayor son abundantes los silicatos y aluminosilicatos como anortita y albita. En las fracciones A y B son relativamente más abundantes partículas conteniendo S y  $\text{FeS}_2$ .

G 12

**DETERMINACIÓN COMPARATIVA DEL VALOR  
ENERGETICO EN DIETAS DE AVES**

**Matías F. Andrada, Juan C.Garro Martínez, A. Devia y G.N. Zamarbide**

**Arca de Química Física, Depto. de Química, Universidad Nacional de San Luis,  
Chacabuco 917, SAN LUIS, 5700; Argentina.**

**E-mail: [mfandra@unsl.edu.ar](mailto:mfandra@unsl.edu.ar)**

Las necesidades materiales y energéticas de los organismos vivos se satisfacen mediante la ingesta de alimentos. Los nutrientes responsables de cubrir la parte energética son los hidratos de carbono, los lípidos y las proteínas que se procesan en las reacciones metabólicas y por lo tanto, la energía total contenida en un alimento o *valor calórico* del mismo, corresponde al calor de combustión ( $\Delta_c H$ ) del alimento.

En el presente trabajo se informan los aspectos termoquímicos involucrados en la determinación comparativa del contenido energético de diferentes muestras de alimentos que constituyeron la dieta de respectivos grupos de palomas, como así también, el  $\Delta_c H$  de los excrementos de los animales recogidos en el tiempo en que fueron alimentados con esos alimentos.

Las experiencias se llevaron a cabo en un calorímetro adiabático de bomba PARR modelo 1241, equipado con un controlador calorimétrico Parr modelo 1720; el peso de cada muestra fue de alrededor de 1 gramo y la presión de oxígeno dentro de la bomba, 30 atmósferas, usando ácido benzoico ( $\Delta_c H = 6.318 \text{ cal/g}$ ) como patrón.

Los resultados, analizados estadísticamente, fueron suministrados al Laboratorio que proveyó las muestras para los correspondientes estudios biológicos.

G 13

**DISPERSION DE CO Y PARTICULAS EN CORREDORES VEHICULARES CON ALTA DENSIDAD DE TRANSITO**

**Horacio Bogo y Enrique San Román**

**INQUIMAE / DQIAyQF, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA  
Ciudad Universitaria, Pabellón II, C1428EHA, Cdad. de Buenos Aires, Argentina  
[bogo@qi.fcen.uba.ar](mailto:bogo@qi.fcen.uba.ar)**

Se realizó la determinación activa de las concentraciones de monóxido de carbono y de material particulado respirable (PM10 y PM2,5) en distintos puntos del Partido de Vicente López, Provincia de Buenos Aires, entre la primavera de 2000 y el invierno de 2001.

Se elaboró un modelo descriptivo en base a la información obtenida para CO en un corredor vehicular encajonado (*street canyon*) en condiciones de alta densidad de tránsito, compatible con el modelo de Johnson pero de mayor simplicidad. En base al mismo pudieron correlacionarse las concentraciones halladas con el cociente  $T/u$ , donde  $T$  es la densidad de tránsito horaria y  $u$  la velocidad del viento. De acuerdo con este modelo y con resultados anteriores obtenidos en condiciones similares se establecen criterios para la predicción de niveles de CO.

Al mismo tiempo se correlacionaron los promedios horarios de PM10 y PM2,5 con las concentraciones de CO y se estudiaron las variaciones estacionales de la concentración de partículas. Sobre la base de la variación de PM2,5 se formulan conclusiones acerca de la capacidad de depuración de la atmósfera y, teniendo en cuenta la variación de PM10, se formulan hipótesis sobre la contribución de la resuspensión al total de partículas respirables.

Los resultados se comparan con información obtenida en distintos sitios de la Ciudad de Buenos Aires.

G 14

**CARACTERISTICAS FISICOQUIMICAS DE ABONOS ORGANICOS**

**V. Palazzi; P. Dominguez; C. Stinco; L. Trejo y M. I. Sánchez de Pinto  
Inst.Cs.Químicas- Fac. de Agronomía y Agroindustrias- UNSE-  
Av.Belgrano (S) 1912- 4200- Santiago del Estero- Argentina.  
e-mail: [inesdep@unse.edu.ar](mailto:inesdep@unse.edu.ar)**

Una forma de aprovechamiento de los residuos orgánicos de naturaleza urbana, agrícola e industrial es su uso como enmienda o abono de suelos. Estos residuos pueden ser sometidos a tratamientos de estabilización, destacándose las tecnologías de compostaje y vermicompostaje, cuyos productos son respectivamente, el compost y lombricompost en distintos estados de estabilización según la duración del proceso. Existen varios factores que pueden afectar estas tecnologías y que a su vez condicionan las características físicoquímicas y calidad de los productos: naturaleza de los residuos, la temperatura, la humedad, la aireación y la duración del proceso.

El objetivo del presente trabajo es determinar la influencia de la duración del proceso de compostaje y vermicompostaje, en las características físicas y químicas de abonos orgánicos.

Durante los procesos de compostaje de la fracción orgánicas de residuos sólidos urbanos domiciliarios (RSUd) provenientes de la planta TARSU y de compostaje-vermicompostaje de residuos agrícolas-ganaderos, se determinó el pH, conductividad, % materia orgánica (MO), %C orgánico total (COT), y %C soluble, %N orgánico total, relación C/N, %P total, %C sustancias húmicas totales (%Cex), %C ácidos húmicos (CAH) y %C ácidos fúlvicos (CAF), capacidad de intercambio catiónico (CIC) y contenido de nutrientes totales K, Na, Ca y Mg. Los valores de pH y conductividad son más altos en los compost urbanos. Los contenidos de MO, N y COT disminuyen rápidamente durante los primeros 90-100 días del proceso, juntamente con las diferentes fracciones de carbono, siendo CAH menor que CAF. Después de los 100 días estas disminuciones son menos significativas, observándose un crecimiento paulatino de los contenidos de CAH y CIC. A los 150 días los abonos orgánicos ya están estabilizados y aptos para su utilización.

**G 15  
ORAL**

**UTILIZACIÓN DE MAPAS AUTO-ORGANIZADOS PARA ANÁLISIS DE DATOS DE MONITOREO AMBIENTAL**

**J. Magallanes<sup>1,4</sup>, J. Zupan<sup>2</sup>, D. Gomez<sup>1,4</sup>, S. Reich<sup>3</sup>, L. Davidowski<sup>1</sup>, N. Groselj<sup>2</sup>**  
<sup>1</sup>U.A. Química-CNEA, <sup>2</sup>National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia, <sup>3</sup>Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad de San Martín, <sup>4</sup>Universidad de Buenos Aires.  
<sup>1</sup>U.A. Química. Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica. Av. Gral. Paz 1499. B1650KNA San Martín. Pcia. de Buenos Aires

Entre los problemas que aborda la quimiometría, se encuentran aquellos que requieren la extracción de información de grandes colecciones de datos, como es el caso de las campañas de monitoreo ambiental que registran datos químicos y meteorológicos. En este trabajo se analiza una campaña de medición de calidad del aire. Se obtuvieron registros horarios durante 45 días de Agosto y Setiembre de 2001 en el Parque Palermo de la Ciudad de Buenos Aires. Entre las varias técnicas de análisis utilizadas, este trabajo apunta a describir particularmente la utilización de mapas auto-organizados, obtenidos a través de redes neuronales artificiales tipo Kohonen. Habitualmente, estos mapas se utilizan para tareas de clasificación de objetos. Sin embargo, este trabajo propone una utilización más extendida introduciendo un concepto nuevo, al que llamamos distancia angular media entre objetos. Este concepto, definible matemáticamente, permite interpretar la distribución final de objetos sobre un mapa de una red Kohonen ya entrenada. La interpretación de este concepto permite la utilización de redes Kohonen de un modo diferente al convencional, dirigiendo el análisis hacia la investigación de la correlación entre las variables del sistema. En este trabajo se muestran resultados sobre conjuntos de datos simulados, para comprobar el método, y sobre datos reales de la campaña de monitoreo previamente mencionada.

**G 16**

**MÉTODO PARAMÉTRICO DE OPTIMIZACIÓN PARA LA DETERMINACIÓN DE As, Sb Y Bi POR ICP-AES CON GENERACIÓN DE HIDRUROS**

**Jorge F. Magallanes<sup>1,2</sup>, Julieta Marrero<sup>1</sup> y Patricia Smichowski<sup>1</sup>**  
 1-Unidad de Actividad Química, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. Gral. Paz 1499, (1650) San Martín, Prov. de Buenos Aires  
 2- FCEN-UBA Pabellón II. Ciudad Universitaria. 1428 Ciudad de Bs. As.  
 e-mail: magallan@cnea.gov.ar

La generación gaseosa de analitos y su posterior introducción en celdas de atomización ofrece varias e importantes ventajas con respecto a los sistemas de nebulización convencionales. Estas incluyen, eliminación de la necesidad de un nebulizador, aumento de la eficiencia de transporte del analito (cerca al 100%), separación de la matriz, preconcentración del analito, mejora notable de los límites de detección, posibilidad de acoplamiento con diferentes técnicas analíticas. La respuesta del sistema depende básicamente de seis variables, las cuales deben optimizarse para obtener la mejor respuesta del sistema con la menor cantidad de experiencias posibles. Sobre la base de experiencias anteriores, se modeló la respuesta del sistema mediante una ecuación de segundo orden. El cálculo de los coeficientes requiere al menos 9 medidas experimentales que se realizaron sobre la base de un diseño experimental de tres niveles para cada factor. Una vez obtenidos los coeficientes se representaron las superficies de respuesta para determinar las coordenadas operativas óptimas.

Este método permite optimizar el sistema con aproximadamente 14 mediciones: 2 para fijar la concentración máxima de NaBH<sub>4</sub>, 3 para fijar la concentración del ácido y 9 para la ajustar el caudal de Ar y el tiempo de retención.

G 17

**ADSORCIÓN DE ARSÉNICO (V)  
POR TRITURADOS DE LADRILLO**  
Gil, Diego M.; Olea, Luis F.; Morán; Juana A. de

**Cátedra Química Inorgánica - Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia  
Universidad Nacional de Tucumán  
Ayacucho 491- (4000) San Miguel de Tucumán –Argentina  
e-mail: jamoran @ unt.edu.ar**

En el presente trabajo se estudian las propiedades del triturado de ladrillo como adsorbente de compuestos de arsénico (V). Se trataron muestras de aguas naturales (Tucumán) y otras preparadas artificialmente, que contenían respectivamente 0,4 mg y 1,3 mg de arsénico por litro. Se determinó la concentración de arsénico empleando el Test Merck para As, y se validaron los resultados mediante un método espectrofotométrico.

Se prepararon triturados de ladrillo que se hicieron pasar por tamices de ensayo para laboratorio, de distintas mallas. Se determinó el área específica de cada triturado por un método de adsorción.

Se agregó a cada muestra de agua volúmenes variables de solución de NaClO, y la cantidad correspondiente del triturado, se agitó y se dejó reposar durante 6 horas como mínimo. Se determinó As en el sobrenadante. Los volúmenes de NaClO variaron desde 0,25 ml hasta 0,75 ml por litro de agua, y las cantidades de triturado entre 1 y 6 gramos. Los tamices utilizados fueron de mallas entre 20 y 80.

Se observó que para un volumen de solución de NaClO de 0,75 ml y 3 g de triturado ( malla N° 80, abertura 177 micrones ), el fenómeno de adsorción era significativo, dado que en una muestra preparada artificialmente de 1,3 mg/L, la concentración se redujo a 0,40 mg/L y en muestras de aguas naturales, de 0,40 mg/L a 0,13 mg/L.

G 18

**MÉTODO ALTERNATIVO PARA LA  
DETERMINACIÓN DE ARSÉNICO EN AGUA**

**K. Rondano, M Hernández Ubeda M Velasco<sup>1</sup> y C.E. López Pasquali**  
**Universidad Nacional de Santiago del Estero – FAA - Instituto de Cs. Químicas**  
**Avda. Belgrano 1912 – 4200 Santiago del Estero –Argentina**  
<sup>1</sup>**Universidad Nacional de Córdoba – FCA - Córdoba**  
**e-mail: krondano@unse.edu.ar**

La presencia de arsénico en aguas de diferentes zonas del país se conoce desde hace muchos años. Y en estos últimos años ha sido amplia y públicamente difundido (publicaciones periodísticas y programas de televisión) la forma en que está afectando, a la salud de los habitantes de esta provincia, el consumo permanente de agua con elevados niveles de arsénico, llegando en algunos casos a causar la muerte. De ahí surge la importancia de implementar nuevos métodos para la cuantificación de dicho analito

En este trabajo, se presentan los resultados obtenidos de la aplicación de un sistema de flujo continuo con detección espectrofotométrica para la determinación de arsénico total en agua.

Para la generación de hidruro se ha tenido en cuenta la reacción de March, donde la reducción del arsénico se realiza con zinc en medio ácido. En este caso, para producir la arsenamina, se tuvo que diseñar especialmente una celda de vidrio de aproximadamente 7 cm de longitud.

La detección del arsénico total se realizó espectrofotométricamente a partir del complejo formado con dietilditiocarbamato de plata.

G 19  
ORALUN MÉTODO SIMPLE PARA ESTIMAR LAS EMISIONES  
DE CO Y NO<sub>x</sub> DE FUENTES MÓVILES**Luis E. Olcese y Beatriz M. Toselli**

Dpto. Fisicoquímica – Fac. Cs. Químicas – Universidad Nac. de Córdoba / INFIQC

5000 – Córdoba

lolcese@fcq.unc.edu.ar

En nuestro país los inventarios de emisiones de gases a la atmósfera son prácticamente inexistentes, debido principalmente al alto costo que implica su realización. En este trabajo, se utilizaron mediciones de concentraciones ambientales de CO y de NO<sub>x</sub>, gases provenientes principalmente de fuentes móviles en dos sitios urbanos en la ciudad de Córdoba, para desarrollar un método simple para estimar las emisiones de estas fuentes móviles. Este desarrollo fue posible porque la contaminación atmosférica urbana primaria en Córdoba se origina fundamentalmente en las fuentes móviles. Se utilizaron datos de la campaña de mediciones realizada por el gobierno de la ciudad durante 1995-1996, durante la cual se obtuvieron datos tanto de la concentración de las diferentes especies como de las variables meteorológicas. Para estimar los factores de emisión, se compararon los niveles medidos de CO y de NO<sub>x</sub> con las predicciones realizadas por un modelo que utiliza la técnica del análisis de regresión. El acuerdo es bueno considerando la simplicidad del método y la poca cantidad de datos disponibles. Los valores obtenidos de emisión por kilómetro recorrido por cada automóvil pueden ser utilizados como punto de partida para la realización de estudios de impacto ambiental.

G 20  
ORALESTUDIO CINÉTICO DE LA INTERACCIÓN DEL ÁCIDO  
D-GALACTURÓNICO (D-GAL) CON CROMO  
HIPERVALENTE Y CARACTERIZACIÓN DE ESPECIES

## INTERMEDIARIAS DE REACCIÓN

**Juan González, Verónica Daier, Silvia García, Luis Sala y Sandra Signorella.**

Área Inorgánica. Depto de Química Física. FCBYF. UNR. Suipacha 531 (2000) Rosario.

e-mail: [inquibir@satlink.com](mailto:inquibir@satlink.com)

El cromo fue identificado como un carcinógeno ocupacional hace más de 100 años. La producción de cáncer en obreros de industrias en las que se manipula el Cr(VI) es objeto de gran interés.

Los hidratos de carbono desempeñan un rol importante en los procesos bioquímicos implicados en la nutrición de las plantas. El ácido poligalacturónico es abundante en las paredes celulares primarias y es un constituyente importante del sistema de transporte apoplástico de las plantas, por lo cual podría ser esencial en la absorción y transporte del cromo en las plantas. Una de las hipótesis en boga, considera a la hidrólisis parcial del polisacárido pectina como una fuente de ácido D-galacturónico (D-gal), el cual complejaría el Cr(VI), facilitando su entrada a través de canales aniónicos. Nuestro objetivo es determinar la capacidad reductora del ácido D-gal, así como su habilidad para estabilizar al Cr(V). Presentaremos las especies formadas entre el ácido D-gal y el Cr(V) a distintos valores de acidez, caracterizadas por técnicas de EPR<sup>1</sup>, como bisquelatos de CrO<sup>3+</sup> pentacoordinados con valores de  $g_{iso}$  de 1,9784-1,9786 y de  $A_{iso}$   $17,2 \cdot 10^{-1} \text{ cm}^{-1}$ . Encontramos que la quelación del Cr(V) se produce fundamentalmente a través del grupo 2-hidroxilácido, lo cual fue confirmado comparando los parámetros espectroscópicos obtenidos por EPR para los bisquelatos de CrO<sup>3+</sup> con ácido L-láctico y L-tartárico. El presente trabajo también incluye la detección del producto de oxidación crómica del ácido D-gal, ácido D-galactárico, determinado por técnicas espectrofotométricas a 350 y 570 nm, y aparición y consumo de Cr(V) por EPR.

<sup>1</sup> Signorella, S., González, J.C., Sala L.F. The Journal of the Argentine Chemical Society, 90 (2002) 3-19.

**G 21**  
**ORAL**

**ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES DEL CROMO CON  
SUSTRATOS DE INTERÉS BIOLÓGICO**

**M.Frascaroli, M.Santoro, L.Ciullo, V. Roldán, S.García, A.Quiroga,  
V.Martínez, M.Álvarez, P.Manzi, V.Andreu, E.Caffaratti, A.Zucchetti**

**S.Signorella, L.Sala**



**Área Inorgánica, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, UNR,  
Suipacha 531, 2000 ROSARIO [inquibir@satlink.com](mailto:inquibir@satlink.com)**

El cromo es un elemento presente en animales, plantas, suelos y desechos volcánicos. Los estados de oxidación más comunes son  $\text{Cr}^0$ ,  $\text{Cr}^{\text{III}}$  y  $\text{Cr}^{\text{VI}}$ . El  $\text{Cr}^{\text{III}}$  se encuentra naturalmente en el ambiente y como tal es esencial para el hombre y los animales. El  $\text{Cr}^{\text{VI}}$ , ampliamente usado en la industria, ha mostrado tener efectos tóxicos y cancerígenos sobre el hombre. Experiencias a nivel biológico sugieren que la presencia de especies intermediarias de cromo, como  $\text{Cr}^{\text{V}}$  y  $\text{Cr}^{\text{IV}}$ , y la formación de radicales libres serían los causantes de los efectos mencionados anteriormente.<sup>1</sup>

Los azúcares desempeñan un importante papel en la estabilización de especies de  $\text{Cr}^{\text{V}}$  formadas por la acción de reductores celulares sobre el  $\text{Cr}^{\text{VI}}$ . Es por ello que estamos abocados al estudio de la habilidad de diferentes compuestos polihidroxilados para estabilizar el  $\text{Cr}^{\text{V}}$ .<sup>2</sup>

Se presentará un análisis comparativo de reactividad de una serie de compuestos polihidroxilados para evaluar la influencia de distintos grupos funcionales y la configuración a nivel de función hidroxilo sobre la reactividad frente a  $\text{Cr}^{\text{VI}}$  y  $\text{Cr}^{\text{V}}$ . Los compuestos bajo estudio son: D-fructosa, 3-O-metil-D-glucosa, D-glucoheptono-1,4-lactona, mioinositol, ácido D-lactobiónico y D-lactitol.

La investigación comprende estudios cinéticos, detección y caracterización de intermediarios de reacción, estudios de EPR en diferentes condiciones de acidez y relaciones  $[\text{S}]:[\text{Cr}]$ , identificación de productos de reacción.

<sup>1</sup> Codd et al., *Coord.Chem.Rev.*, 2001, **216/217**, 533.

<sup>2</sup> Rizzotto et al., *J.Chem.Soc. Dalton Trans.*, 2002, 3206.

**G 22**

**EFFECTO DE LAS SUSTANCIAS HÚMICAS EN LA  
ASOCIACIÓN DE UN COLORANTE TRIFENILMETANO**

**Graciela Zanini†\*, Marcelo Avena‡, Sarah Fiol† y Florencio Arce†**  
\*Depto de Físicoquímica. Fac. Cs.Químicas. Universidad Nacional de Córdoba.  
‡Depto de Química. Universidad Nacional del Sur. Bahía Blanca  
†Depto. de Química Física. Facultad de Química. Universidad de Santiago de  
Compostela. España. E-mail: [gzanini@mail.fcq.unc.edu.ar](mailto:gzanini@mail.fcq.unc.edu.ar)

Las múltiples aplicaciones de los colorantes derivados del trifenilmetano (TFM) hacen que ellos formen parte de muchos desechos industriales y que se los encuentre como contaminantes en suelos y cuerpos de agua naturales.

Dependiendo de sus propiedades químicas, estos colorantes pueden encontrarse como moléculas discretas disueltas en el medio acuoso, o interactuar con otros materiales permanciendo adsorbido a partículas minerales o ligados a la materia orgánica.

El transporte y destino de los colorantes es fuertemente dependiente del material con el que interactúan y del tipo de interacciones que tienen lugar. La solubilidad, velocidad de degradación, fotólisis y la transferencia hacia sedimentos son unos pocos ejemplos de los procesos que pueden ser modificados por la presencia de minerales y materia orgánica.

Este trabajo presenta un estudio de la interacción entre Cristal Violeta (CV) y un ácido húmico (AH) por medio de espectroscopia UV-Vis. El estudio se llevó a cabo en condiciones de pH y fuerza iónica donde el AH se encuentra cargado negativamente y el CV posee cargas positivas.

Los resultados muestran un marcado efecto de la presencia del AH en las curvas espectrales del CV. El AH favorece considerablemente la agregación de las moléculas de colorante y la técnica utilizada permitió evaluar la magnitud de la interacción AH-CV.

G 23

**ESTUDIOS PRELIMINARES DE LA  
CARBOCLORACIÓN DE Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

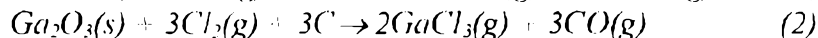
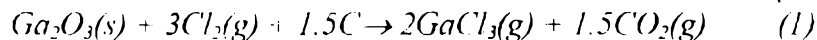
**J. A. González, J. B. Rivarola y M. del C. Ruiz**

**Casilla de Correo 290, 5700 San Luis, Argentina**

**Universidad Nacional de San Luis**

**E-mail: mruiz@unsl.edu.ar**

Este trabajo presenta los resultados de los ensayos preliminares de la carbocloración de una mezcla de óxido de galio puro y carbón de sacarosa al 30 %. Las reacciones involucradas en este proceso son las siguientes:



El cálculo de la energía libre estándar muestra que el agregado de carbón favorece termod. la cloración del Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. La reacción fue seguida mediante termogravimetría. Se utilizó un equipo adaptado para trabajar en atmósfera corrosiva. Los experimentos fueron llevados a cabo en condiciones isotérmicas y no isotérmicas. Se usó el sistema de muestras múltiples, dado que trabajar con una sola muestra lleva o obtener resultados no reproducibles, debido a la influencia que tiene el cambio de atmósfera sobre la reactividad del carbón. Los sólidos, reactivos y productos, fueron caracterizados usando difracción de rayos X (DRX) y microscopía electrónica de barrido (SEM).

Los resultados indican un aumento de la reactividad del sistema, respecto a la reacción de cloración directa. El estudio del efecto de la temperatura mostró que la cloración de la mezcla Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-carbón de sacarosa comienza a aproximadamente 300 °C y es total a 550 °C en 40 minutos, quedando en el residuo un remanente de carbón sin reaccionar. El balance de masa para la reacción de carbocloración permitió establecer que hubo un consumo promedio de carbón del 13.6%, lo que implica que, en las condiciones experimentales de trabajo, las reacciones (1) y (2) ocurren en forma simultánea.

G 24

**CLORACIÓN DE LA MEZCLA DE Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

**F. Túnez, M. del C. Ruiz y J. A. González**

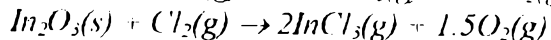
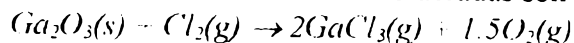
**Universidad Nacional de San Luis**

**Casilla de Correo 290, 5700 San Luis, Argentina**

**E-mail: jgonza@unsl.edu.ar**

El uso de los procesos de cloración para la extracción de metales, ya sea usando métodos piro o hidrometalúrgicos, ha generado gran atención en décadas recientes y se espera un importante uso de la química del cloro en los años venideros. Indio y Galio son recuperados durante el proceso de extracción de otros metales, tales como aluminio y cinc, de minerales u otros materiales.

Este trabajo tiene por objeto determinar la factibilidad de separación de In y Ga mediante la cloración directa de una mezcla de óxidos al 50% en peso, con vistas a recuperar los metales mencionados de desechos electrónicos o de residuos provenientes del procesamiento de minerales. Las reacciones de cloración involucradas son las siguientes.



Los cálculos termodinámicos de cambio de energía libre de Gibbs muestran que la cloración directa de estos óxidos es factible por encima de 870 °C y 600 °C para Ga e In, respectivamente.

La reacción fue seguida siguiendo la pérdida de masa de la mezcla de óxidos en un equipo que permite trabajar con cloro puro. Se realizaron ensayos isotérmicos y no isotérmicos. Los resultados experimentales obtenidos con los óxidos puros muestran que la cloración de Ga comienza a aproximadamente 650 °C y la de In a 400 °C. Los reactantes y residuos sólidos fueron caracterizados mediante difracción de rayos X (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX) y microscopía electrónica de barrido (SEM).

G 25

**LIBERACION DE COMPUESTOS  
ENCAPSULADOS EN GELES DE PECTINAS**

**María Eugenia Monge(1), Delia Bernik, Martín Eguaras y Martín Negri.**  
DQIAyQF. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Univ. de Buenos Aires.  
Pabellón II, 1<sup>er</sup> piso, Ciudad Universitaria, C1428EHA. Buenos Aires, Argentina.  
<sup>1</sup>Laboratorio de Artrópodos, Univ. Nacional de Mar del Plata. Argentina.  
E-mail: [memonge@qi.fcen.uba.ar](mailto:memonge@qi.fcen.uba.ar)

El objetivo del trabajo es el encapsulamiento de sistemas multicomponentes en una matriz biocompatible que permita la liberación controlada y detección de los mismos en la fase gaseosa con una nariz electrónica. Se utilizan geles de pectinas como medio de encapsulamiento, habiéndose puesto a punto la técnica de preparación de geles. Mediante el encapsulamiento de saborizantes se comprobó la eficiencia de la nariz electrónica para detectar la presencia de los mismos en fase aérea y diferenciarlos mediante sus huellas digitales. Además se verificó la retención de los saborizantes encapsulados en los geles. El cambio más apreciable en los patrones de los flavors encapsulados es la disminución de la intensidad de las señales. En algunos casos también se modifica la forma de las huellas digitales debido a una liberación preferencial de compuestos en una mezcla. Los resultados son promisorios en cuanto a que se pueden extender los estudios a otros compuestos de presión de vapor adecuada. En particular, se desea encapsular aceites esenciales provenientes de plantas autóctonas y lograr una liberación lenta de los mismos en un lapso no menor a dos semanas. Los aceites esenciales tienen distinto tipo de acción como pesticidas. Son extractos difíciles de encapsular debido a la multiplicidad de componentes, como surge de su análisis por CGL y CG-EM. Se estudia al presente la capacidad de geles mixtos para optimizar dicho encapsulamiento.

G 26

**ATG, DTA, IR y DRX DE HIDRATOS DE NITROPRUSIATO  
DEL NIQUEL (II)**

**Francisco Molinari, M. Inés Gómez y Alba Benavente**  
**Instituto de Química Inorgánica. Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia.**  
**Universidad Nacional de Tucumán. Ayacucho 471. 4000. San Miguel de Tucumán.**  
[pacomol@unt.edu.ar](mailto:pacomol@unt.edu.ar)

En el presente trabajo se preparó el nitroprusiato del níquel (II) en diferentes condiciones experimentales, a fin de estudiar la influencia del método de preparación en las propiedades fisicoquímicas de los hidratos resultantes. Para los mismos se realizaron los siguientes análisis: Análisis termogravimétrico (ATG), termodiferencial (DTA), Espectroscopia de infrarrojo (FTIR), y difracción de rayos X de polvo (DRX).

El método de preparación utilizado es el ya descrito en trabajos anteriores, modificándose las condiciones de cristalización como ser variación de la temperatura, agitación, control de la presión de vapor, entre otras.

En base a la pérdida registrada por análisis termogravimétrico, uno de los hidratos estables obtenido es el tetrahidrato. El análisis del DRX de polvo de este hidrato, indicaría que la muestra cristaliza en el sistema cúbico, quedando pendiente la resolución completa de su estructura cristalina y su eventual refinamiento por el método Rietveld. De igual manera se procedió para el hexahidrato.

G 27

**EFFECTO DEL MEDIO SOBRE LA INTERACCIÓN DE  
ÉSTERES DE CALIXARENOS CON PICRATOS  
ALCALINOS.**

M. A. Pugliese<sup>1</sup>, M. T. Goitia<sup>1</sup>, M. E. Montero<sup>1</sup>, A. R. Casal<sup>1</sup>, A. F. Danil de Namor<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Química Analítica, Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur. 8000. Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup>Laboratory of Thermochemistry, Department of Chemistry, University of Surrey, Guildford, Surrey GU2 5XH, UK.

Los calixarenos son productos obtenidos por condensación de fenoles *p*-sustituídos y formaldehído en medio alcalino. En trabajos anteriores nuestro grupo ha estudiado la interacción de cationes alcalinos (contraión picrato) con ésteres de calixareno en los sistemas solvente: agua-benzonitrilo, agua-nitrobenceno, agua-diclorometano, agua-cloroformo. Recientemente se demostró que la formación de complejos entre derivados ésteres y cetónicos de calixarenos y cationes bivalentes incluyendo metales tóxicos como mercurio (II), cadmio (II) y plomo (II) solo ocurre en acetonitrilo. Esto se atribuyó a la propiedad receptiva de la cavidad hidrofóbica de estos macrociclos para hospedar al solvente y la consecuente preorganización de la cavidad hidrofílica para complejar cationes bivalentes. Se concluyó que el aducto calixareno-acetonitrilo y no el ligando libre es responsable de la interacción observada con estos cationes. Teniendo en cuenta este antecedente se llevaron a cabo experimentos de distribución de cationes alcalinos con el tetraetil éster de *p*-*tert*-butil calix[4]areno empleando un sistema solvente agua-acetonitrilo-cloroformo. La comparación de los resultados obtenidos en estas condiciones operativas con aquellos en ausencia de acetonitrilo demuestra la notable influencia que éste ejerce sobre la extracción.

G 28

**ESTUDIOS ESTRUCTURALES Y DE LIBERACIÓN DE  
DROGAS EN MATRICES DE BIOPOLÍMEROS**

Nora J. Francois<sup>(1)</sup>, Ana M. Rojas<sup>(2)</sup>,  
Marta E. Daraio<sup>(1)</sup> y Delia L. Bernik<sup>(3)</sup>

(1) Depto. de Química, Fac. de Ingeniería, UBA. Paseo Colón 850, (1063) Buenos Aires, nfranco@fi.uba.ar. (2) Depto. de Industrias, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, Ciudad Universitaria, Buenos Aires. (3) INQUIMAE, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, UBA. 3er Piso, Pabellón 2, Ciudad Universitaria, Buenos Aires.

El escleroglucano y el xanthano son biopolímeros hidrofílicos con aplicaciones como matriz en procesos de liberación controlada. Se presentan resultados acerca de la caracterización estructural de sistemas acuosos de escleroglucano mediante estudios de reometría dinámica. Se discute la relación entre las características estructurales y reológicas del sistema polimérico y la cinética de liberación de una molécula modelo, Teofilina. Se analizó el comportamiento reológico y cinético del sistema a distintas temperaturas variando la concentración del polímero. Los estudios reológicos dinámicos muestran transiciones estructurales en el régimen de gel, que coinciden con cambios observados en el comportamiento cinético de la liberación de la droga. El comportamiento reológico del material es el de un sólido elástico debido a que el módulo de almacenamiento ( $G'$ ) resulta siempre mayor que el módulo de pérdida ( $G''$ ), y es independiente de la frecuencia, en el rango de 0.1 a 2 Hz. La inclusión de pequeños porcentajes de Teofilina en el gel introduce cambios en la estructura de la matriz (relacionados con los valores de  $G'$  y  $G''$ ), modificando en consecuencia su propio perfil de liberación. El comportamiento cinético se evaluó mediante la aplicación de una ecuación semiempírica del tipo ley de potencia, que permite obtener información sobre los procesos de transporte predominantes de la molécula encapsulada en la fase gel. Se compara la cinética de liberación de Teofilina a partir de matrices de xanthano con los resultados obtenidos en escleroglucano.

G 29

NATURALEZA DE LAS INTERACCIONES EN GELES  
OBTENIDOS POR COAGULACION ENZIMATICA DE LA  
LECHE A DOS TEMPERATURAS: 25 Y 38°C

**Adriana Alessi<sup>a</sup>, Alicia Fontana<sup>a</sup>, Miryam S. Pires<sup>b</sup> y Carlos A. Gatti<sup>a</sup>**  
**Departamento de <sup>a</sup>Química Física y <sup>b</sup>Química Analítica de la Facultad de Ciencias  
Bioquímicas y Farmacéuticas de la Universidad Nacional de Rosario, Suipacha 531  
(2000) Rosario. TE/FAX: 0341-4372704 E-mail: [cgatti@fbioyf.unr.edu.ar](mailto:cgatti@fbioyf.unr.edu.ar)**

La estructura de los geles obtenidos por coagulación enzimática de la leche es afectada, por variables tales como el tratamiento térmico previo de la leche, pH, cantidad de cuajo, etc., dando origen a geles con diferente porosidad, permeabilidad, resistencia mecánica, etc.: características que son determinadas por el tipo de interacciones que se presentan entre las cadenas proteicas que integran la malla del gel.

En el presente trabajo se ha propuesto comparar el tipo de interacciones que se presentan en geles obtenidos en dos condiciones de temperaturas diferentes: 25°C y 38°C. La metodología aplicada se basa en la capacidad de las proteínas gelificadas de resistir la disociación frente a la acción de soluciones de urea, EDTA y NaCl en distintas concentraciones, quienes evidencian uniones hidrofóbicas y electrostáticas (mediadas o no por Ca<sup>2+</sup>) respectivamente. Esa capacidad fue evaluada a través del contenido de proteínas solubilizadas y liberación de fosfato luego de la acción de cada agente disociante sobre el gel en estudio. Al mismo tiempo se realizaron electroforesis en cada uno de los casos para evaluar qué tipo de proteínas es liberado con cada agente disociante y en cada tipo de geles. Los resultados frente a cada agente disociante muestran diferencias de acuerdo al tipo de gel, evidenciando diferencia en la participación de las distintas interacciones en los geles.

G 30

APLICACIÓN DE LA ISOTERMA DE BET A LA SORCIÓN  
DE PETRÓLEO EN SUELOS - USO COMPARATIVO  
DE COMPUESTOS PUROS

**Ríos S. M., Katusich O., Velasquez S. y Nudelman N.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Dpto. de Qca. Orgánica, FCEyN, UBA, Bs. As., Argentina, [nudelman@qo.fcen.uba.ar](mailto:nudelman@qo.fcen.uba.ar)  
Dpto. de Qca., FCN, UNPSJB, Comodoro Rivadavia, Chubut, Argentina,  
[riossm@unpata.edu.ar](mailto:riossm@unpata.edu.ar)

En esta investigación se ha utilizado la isoterma de BET como modelo para la interpretación de la sorción de un sistema multicomponente. La siguiente ecuación, que expresa la isoterma de BET para un número finito de capas sorbidas, es válida estrictamente para un solo contaminante y no para una mezcla de ellos.

$$q_e = K_1 + K_2 \sum_{i=1}^m (C e^i) / (1 + K_1 + \sum_{i=1}^m C e^i)$$

Sin embargo se ha evaluado su aplicabilidad considerando al petróleo como un solo componente. K<sub>1</sub> y K<sub>2</sub> son constantes, i es el número de capa, m es el número total de capas y q<sub>e</sub> (mg kg<sup>-1</sup>) y C<sub>e</sub> (mg L<sup>-1</sup>) son las concentraciones de contaminante en la fase sólida y líquida respectivamente. Se ha seleccionado al fenantreno y a la piridina como compuestos tipo para evaluar la aplicabilidad del modelo sobre arcillas.

La diferencia entre los valores experimentales y los predichos por el modelo es de 3% para el fenantreno, 13% para el petróleo y 16% para la piridina (cuadrados), indicando una buena correlación con la observación experimental. Según la Teoría de BET, K<sub>1</sub> esta relacionada con el calor promedio de sorción de la primer monocapa. Para el fenantreno es 0,0044±0,0001 L mg<sup>-1</sup>, para el petróleo es 0,0131±0,001 L mg<sup>-1</sup> y para la piridina es 0,727±0,066 L mg<sup>-1</sup>, estos valores podrían indicar diferencias significativas en el tipo de interacción presente en cada caso estudiado.

G 31

**ESTUDIO DE UN MÉTODO ALTERNATIVO PARA EL ANÁLISIS DE CARBONO EN CARBUROS DE METALES DE TRANSICIÓN**

**Ana Laura PAREJA VIÑAVEYA y Silvia Alejandra ALCONCHEL**  
**Química General. Departamento de Química. Facultad de Ingeniería Química.**  
**Universidad Nacional del Litoral.**  
**Santiago del Estero 2829. (3000) Santa Fe.**  
**E-mail: [salco@fiqus.unl.edu.ar](mailto:salco@fiqus.unl.edu.ar)**

El procedimiento convencional para la determinación de carbono en carburos de metales de transición involucra la combustión del carburo en oxígeno a aproximadamente 900 °C y la estimación del dióxido de carbono formado por manometría, gravimetría, espectrometría IR, conductimetría, amperometría o cromatografía gaseosa. En todos los casos se obtiene como resultado el contenido de carbono total que incluye el carbono combinado (carbono de red) y el carbono libre (carbono grafito). En este trabajo se presenta un método de análisis de carbono alternativo basado en la oxidación del carburo con una solución saturada de dicromato de potasio en ácido sulfúrico 9 M, absorción del dióxido de carbono generado en una solución diluida de hidróxido de bario y detección del mismo mediante monitoreo continuo de la conductividad eléctrica de la solución de hidróxido de bario. Se detalla el diseño de una columna de absorción que permite una renovación constante de la solución de hidróxido de bario sobre la celda de conductividad bajo flujo de argón. El contenido de carbono se evaluó utilizando una curva de calibrado que correlaciona el área de la primer derivada de los gráficos de conductividad eléctrica en función del tiempo con cantidades conocidas de carbono presente en muestras de hidrógenofalato de potasio ( $\text{KHC}_8\text{H}_4\text{O}_4$ ). Ensayos preliminares efectuados sobre carburo de molibdeno ( $\beta\text{-Mo}_2\text{C}$ ) indicaron que el sólido contiene un 5,9 % de carbono en concordancia con el porcentaje teórico que puede oscilar entre 5,9 y 6,1 % dependiendo de las condiciones de procesamiento del material.

G 32

**ESTUDIO ESPECTROFOTOMETRICO Y VOLTAMETRICO DE LA ESTABILIDAD DEL COMPLEJO FE(II)-1,10-FENANTROLINA EN MEDIO ACIDO**

**A.J. Ruggeri, N.Wilke, R.A. Iglesias y S.A. Dassie**  
**Dpto. de Fisicoquímica - Fac. de Cs. Químicas - Univ. Nacional de Córdoba**  
**Pabellón Argentina. Ala 1. Piso 2. Ciudad Universitaria**  
**e-mail: [wilke@mail.feq.unc.edu.ar](mailto:wilke@mail.feq.unc.edu.ar)**

Los complejos de hierro con el ligando neutro 1,10-fenantrolina (fen) son ampliamente utilizados en el área de la química analítica como indicadores redox. En particular,  $[\text{Fe}(\text{fen})_3]^{2+}$  se utiliza también para el dosaje de hierro utilizando métodos cinéticos de análisis debido a su inestabilidad en medio ácido.

En este trabajo se presenta un estudio de la cinética de intercambio de ligando ( $\text{fen} \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ ) para el complejo  $[\text{Fe}(\text{fen})_3]^{2+}$  en medio ácido mediante técnicas espectrofotométricas y voltamétricas. Se determinaron las constantes de velocidad a diferentes temperaturas y la energía de activación del proceso. Por otra parte, se observó que el aumento de la fuerza iónica del medio provoca una disminución de la velocidad de la reacción probablemente debido a una asociación iónica.

A partir de los valores de las constantes de velocidad obtenidas y de constantes de acomplejamiento y ácido-base informadas en bibliografía se realizó un estudio de especiación en fase homogénea. La formación de las especies protonadas del ligando ( $\text{Hfen}^+$  y  $\text{H}_2\text{fen}^{2+}$ ) favorecen, desde el punto de vista termodinámico, el proceso de intercambio de ligando.

G 33

**LLE: SISTEMA CUATERNARIO CICLOHEXANO-BENCENO-ETANOL-AGUA**

**Mónica Gramajo de Doz, Carlos Bonatti y Horacio Sólido**  
**Dpto. de Física - Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad**  
**Nacional de Tucumán, Av. Independencia 1800.**  
**4000 Tucumán. Argentina. E-mail: hsolimo@herrera.unt.edu.ar**

También en este trabajo se estudió el diagrama de fases cuaternario del título y todos sus subsistemas ternarios a 303,15 K con idéntica finalidad y metodología que el diagrama cuaternario con metanol presentado en este mismo Congreso. La diferencia esencial entre ambos trabajos es que en éste existe un diagrama ternario completamente miscible desde que etanol es soluble en todo tipo de hidrocarburos, mientras que metanol es parcialmente soluble en ciclohexano. Ambos sistemas son susceptibles de ser utilizados como naftas reformuladas, en las cuales el alcohol provee el oxígeno necesario para dicho tipo de nafta. De allí que interese conocer la distribución de agua y alcohol en sistemas de esta naturaleza dado que es de vital importancia que no se produzca separación de fases, siendo la tolerancia de agua (concentración) en este sistema mayor que en aquel con metanol, aunque continúa siendo pequeña.

El ajuste fue bastante pobre en el coeficiente de distribución de los sistemas ternarios debido a la baja concentración de algunas especies involucradas en ambas fases, mientras que fue bueno en términos de la curva binodal cuando se utilizó el modelo UNIQUAC. Igual conclusión se obtuvo con el modelo UNIFAC.

También en este trabajo se predijo el diagrama cuaternario empleando los modelos UNIFAC y UNIQUAC. Para este último se utilizaron parámetros de interacción surgidos del promedio de los parámetros binarios obtenidos de los tres diagramas ternarios en él contenidos.

G 34

**LLE: SISTEMA CUATERNARIO CICLOHEXANO-BENCENO-METANOL-AGUA**

**Mónica Gramajo de Doz, Carlos Bonatti y Horacio Sólido**  
**Dpto. de Física - Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología,**  
**Universidad Nacional de Tucumán, Av. Independencia 1800.**  
**4000 Tucumán. Argentina. E-mail: hsolimo@herrera.unt.edu.ar**

Se estudió el diagrama de fases cuaternario del título y todos sus subsistemas ternarios a 303,15 K con la finalidad de conocer la tolerancia de agua en la fase orgánica, así como la transferencia de metanol a la fase acuosa. Se observó que dicha tolerancia es muy pequeña y que existe una pérdida de metanol muy importante hacia la fase acuosa. Al mismo tiempo, la concentración de benceno en la fase orgánica generalmente resulta mayor que la de ciclohexano. A los fines de determinar la superficie binodal, se seleccionaron cuatro planos seccionales cuaternarios obteniéndose líneas de unión a través de análisis cromatográfico en fase gaseosa empleando el método del estándar interno para la cuantificación. Tal como era previsible, se observó miscibilidad parcial entre metanol y ciclohexano lo que genera cuatro sistemas ternarios con miscibilidad parcial en el diagrama estudiado.

Los resultados ternarios fueron predichos con el modelo de contribución de grupos UNIFAC y correlacionados con el UNIQUAC. Los parámetros binarios obtenidos con este último modelo a partir de resultados ternarios fueron promediados y dichos valores se utilizaron para predecir el sistema cuaternario. Con esta misma finalidad se utilizó también el modelo UNIFAC. Ambos modelos resultaron apropiados para este sistema, a pesar que este UNIFAC no resultó adecuado para el sistema ternario metanol + benceno + ciclohexano (porque predice una zona de miscibilidad parcial mucho mayor que la observada experimentalmente), incluido en el diagrama cuaternario.

**G 35**

**CARACTERIZACIÓN DEL COMPLEJO 1:2 FORMADO POR  $\text{AlCl}_3$  y 5,7-DIHIDROXIFLAVONA. EFECTO SOLVENTE.**

**G. T. Castro, S. L. Arce, E. I. Gasull, S. E. Blanco.**

**Proyecto 2-9300. Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia. Universidad Nacional de San Luis. (5700) San Luis. Argentina.**

**E-mail: tcastro@unsl.edu.ar**

Se sabe que las interacciones soluto-solvente son de gran importancia en el grado de ocurrencia y velocidad de diversas reacciones químicas. Prosiguiendo investigaciones previamente realizadas con el objeto de precisar la capacidad de quelación de iones metálicos de flavonoides y benzofenonas simples, en este trabajo se estudió el sistema  $\text{AlCl}_3$ -5,7(OH)<sub>2</sub>flavona en alcoholes primarios. En primer lugar se detectó y determinó la composición estequiométrica del complejo formado en solución. Para ello se usaron técnicas espectroscópicas UV-visible y métodos analíticos como el *de relación molar* y el *método de Job*. Luego se realizó un estudio cinético a 25°C en los solventes alcohólicos efectuando lecturas de absorbancia a la  $\lambda_{\text{máx}}$  del complejo, hasta alcanzar el equilibrio (2-3h). La gráfica de absorbancia vs. la razón  $[\text{AlCl}_3]/[5,7(\text{OH})_2\text{flavona}]$ , mostró un punto de inflexión para una relación 0,5, lo cual indica la formación de un complejo entre  $\text{AlCl}_3$  y 5,7(OH)<sub>2</sub>flavona de composición 1:2. Al formarse el complejo, la banda principal del ligando experimenta un corrimiento batocrómico de 68 nm, 69nm y 68,5nm en MeOH, EtOH y PrOH, respectivamente. Los valores de las constantes de equilibrio ( $1,8 \cdot 10^{12}$  en PrOH), muestran que prácticamente, la reacción es total. La concentración del complejo en PrOH a los 35min de reacción sólo difiere en un 2% de su valor máximo. A iguales tiempos de reacción esta diferencia es del 9% en EtOH y del 16% en MeOH. Los resultados obtenidos fueron explicados muy satisfactoriamente mediante parámetros empíricos de los solventes que cuantifican la capacidad de solvatación y la habilidad dadora de uniones hidrógeno que poseen.

**G 36**

**DIFERENCIACION DE DILUCIONES DE ALCOHOLES ALIFATICOS Y FENOL EN AGUA MEDIANTE UNA NARIZ ELECTRONICA**

**Virginia Emilse Diz<sup>(1)</sup>, Miryam Cassanello<sup>(2)</sup> y Martín Negri<sup>(1)</sup>**

**(1) Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física.**

**(2) Departamento de Industrias.**

**Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.**

**Paellón II, 1<sup>er</sup> piso, Ciudad Universitaria, C1428EHA. Buenos Aires, Argentina.**

**E-mail: vdiz@qi.fcen.uba.ar**

El objetivo del trabajo es detectar la presencia y discriminar distintos alcoholes alifáticos primarios y fenol, diluidos en agua en bajas proporciones. Para ello se realizaron determinaciones de huellas digitales de los vapores de dichas diluciones mediante una nariz electrónica desarrollada en el laboratorio (\*). Se llevaron a cabo determinaciones tanto de los alcoholes puros como de sucesivas diluciones de los mismos, en el rango de 1% a 10% V/V. Las huellas digitales están dadas por las señales de los sensores de gases que componen la nariz electrónica, representándose mediante gráficos radiales.

La discriminación entre soluciones de alcoholes diferentes se obtuvo en primer instancia a partir de la forma de los gráficos radiales, mientras que la discriminación entre distintas diluciones de un mismo alcohol se halló de la diferencia de intensidad de las señales. En una segunda instancia se realizó un análisis estadístico de Componentes Principales que permitió diferenciar diluciones de alcoholes alifáticos de las de fenoles. Este estudio muestra la potencialidad de la aplicar la metodología de nariz electrónica para determinaciones cualitativas y para lograr un análisis continuo de alcoholes en efluentes acuosos.

(\*O'Connell et al, Sensors & Actuators B, 80 (2001) 149-154

**G 37  
ORAL**

## **NUEVO SISTEMA LIDAR PARA LA MEDICIÓN DE OZONO Y VAPOR DE AGUA ATMOSFÉRICOS EN EL CEILAP**

**Elián WOLFRAM<sup>(1)</sup>, Andrea PAZMIÑO<sup>(1)</sup>, Dardo LAZARTE<sup>(1,4)</sup>, Juan C. DWORNICZAK<sup>(1)</sup>, Javier FOCESATTO<sup>(1)</sup>, Jacques. PORTENEUVE<sup>(3)</sup> y Eduardo QUEL<sup>(1)</sup>.**

<sup>1</sup> CEILAP (CITEFA-CONICET). Zufriategui 4380. 1603 VILLA MARTELLI.

<sup>2</sup> Becario CONICET

<sup>3</sup> Service d'Aeronomie CNRS. Université Pierre et Marie Curie. BP 102. 75252 Paris Cedex.

<sup>4</sup> Universidad Nacional de General San Martín.

E-MAIL: [ewolfram@citefa.gov.ar](mailto:ewolfram@citefa.gov.ar)

Un nuevo sistema lidar de absorción diferencial (DIAL Rayleigh-Raman) para la medición de ozono atmosférico y vapor de agua está desarrollándose en el CEILAP (Centro de Investigaciones en Láseres y Aplicaciones) ubicado en los suburbios de Villa Martelli, provincia de Buenos Aires. La técnica lidar ha demostrado ser útil y potente en el estudio de los diferentes componente atmosféricos, permitiendo además de la medición de sus concentraciones la cuantificación de la evolución dinámica de los mismos. El presente trabajo describe las mejoras realizadas en este nuevo sistema las cuales están vinculadas principalmente con la energía y frecuencia operativa de los láseres, el área efectiva de recolección de la señal, la utilización de una red de difracción para separar las diferentes señales adquiridas y una mejora sustancial en la detección y adquisición simultanea de las diferentes vías. Este sistema detectará siete señales: las señales de retrodifusión elásticas correspondientes a las longitudes de onda láser detectadas en alta y baja energía, así como también como las señales originadas desde la dispersión inelástica Raman del nitrógeno y del vapor de agua. Las señales Raman de la molécula de nitrógeno excitadas con las longitudes de onda láser (308 y 355 nm) permitirán corregir la contaminación de la señal debida a la presencia de los aerosoles estratosféricos de origen volcánico. Todo este sistema será montado en un laboratorio móvil el cual permitirá hacer mediciones en diferentes lugares del territorio argentino.

**G 38  
ORAL**

## **FUENTE PULSADA Y SENSOR DE IONIZACIÓN PARA LA GENERACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UN HAZ MOLECULAR PULSADO**

**Autores: A. Carrera<sup>1</sup>, G. Moriena<sup>1</sup>, R. Fernández Prini<sup>1,2</sup>, E. Marceca<sup>1</sup>**  
**<sup>1</sup>INQUIMAE, FCEN, UBA, Ciudad Universitaria, 3<sup>er</sup> piso, Pab II (1428)**  
**Bs.As. <sup>2</sup>Unidad de Actividad Química, CNEA.**

E-mail: [marceca@qi.fcen.uba.ar](mailto:marceca@qi.fcen.uba.ar)

Los haces moleculares son empleados crecientemente para estudiar experimentalmente las propiedades de nanopartículas aisladas como así también para controlar la formación de depósitos de partículas. La generación y estabilización de agregados moleculares en el haz, se realiza tras una expansión isoentrópica de materia en alto vacío. Con el objeto de establecer haces moleculares estables de alta intensidad y resolución energética, la introducción del material en las cámaras de vacío debe realizarse durante cortos lapsos de tiempos (microsegundos), separados por periodos de espera de mayor duración (milisegundos). Este trabajo presenta el diseño y la puesta a punto de una válvula solenoide de respuesta rápida, que permite restringir el tiempo de inyección de gas a lapsos de hasta 100µs. Se presenta además el diseño de un nuevo sistema rápido para medir la presión residual a la salida de la válvula solenoide. Este sensor, basado en la ionización de gas por impacto electrónico, se emplea para determinar la velocidad, resolución energética y demás características del perfil de intensidad del pulso de moléculas.

**G 39**

**FORMACIÓN DE ESTRUCTURAS ESPACIO-TEMPORALES  
EN REACTORES QUÍMICOS**

**Marcelo Kuperman**

**Centro Atómico Bariloche**

**Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET**

**Instituto Balseiro (UNC and CNEA)**

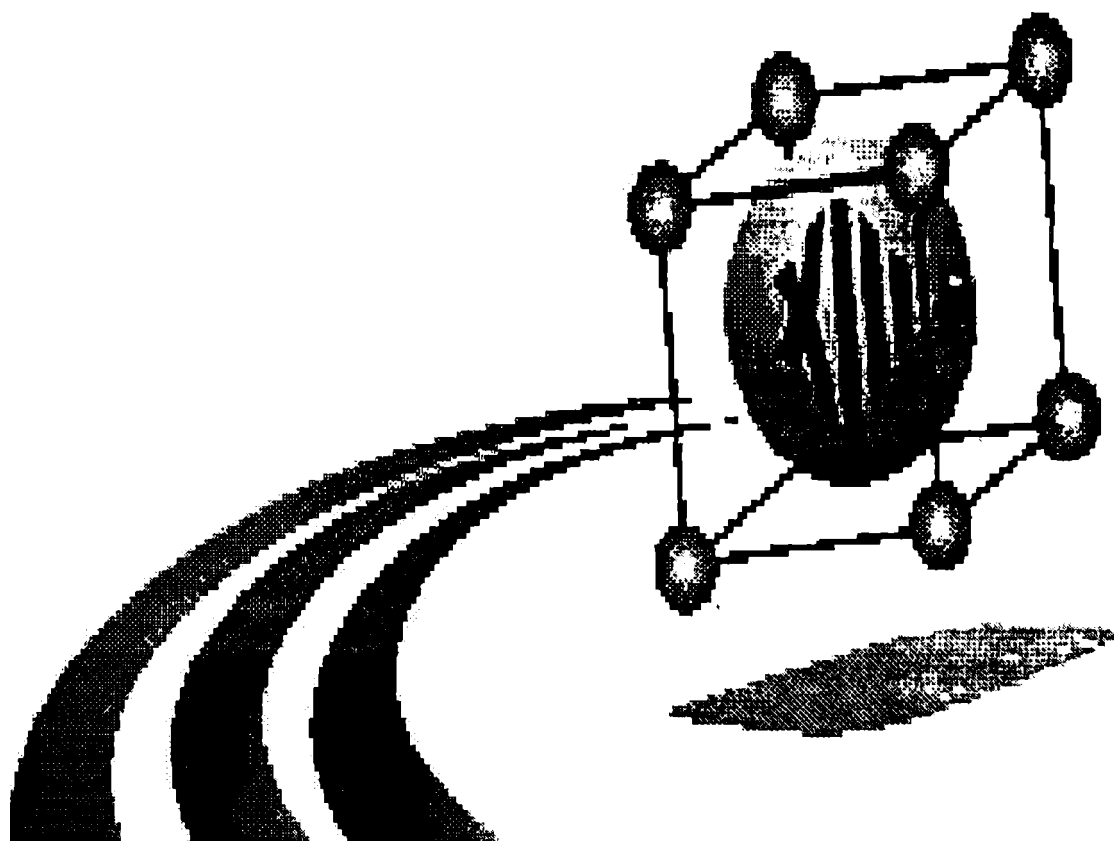
**Av. Bustillo km 9.5, R8402AGP - S. C. de Bariloche, Argentina**

**[kuperman@cab.cnea.gov.ar](mailto:kuperman@cab.cnea.gov.ar)**

La formación de estructuras espaciotemporales en sistemas químicos fue observada por primera vez por Belousov en 1907. La reacción, conocida actualmente como de Belousov -Zhabotinskii presenta oscilaciones temporales y formación de espirales. En los últimos años, el estudio de estructuras espaciotemporales en sistemas alejados del equilibrio ha avanzado notablemente gracias a la implementación de reactores químicos abiertos, alimentados continuamente. En este trabajo mostraremos resultados obtenidos en un reactor continuamente agitado y alimentado (CSTR) que permite mantener al sistema en estudio fuera de equilibrio y acoplar procesos de reacción y difusión. La reacción estudiada es la oxidación del tetrionato por clorito. Mostraremos las estructuras que se pueden encontrar y un modelo sencillo que permite explicar su origen y producir simulaciones numéricas.

*SECCIÓN H*

*BIOFISICOQUÍMICA*



**XIII Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y Química Inorgánica.  
7 al 10 de Abril – 2003 - Bahía Blanca - Argentina**



## SECCIÓN H

| Sección y Número | TÍTULO   | AUTORES  | Modalidad |
|------------------|--|--|-----------|
| H1               | DESARROLLO Y APLICACIÓN DE UN NUEVO CÓDIGO QM-MM BASADO EN UN ESQUEMA DFT CON BASES NUMÉRICAS                          | Alejandro CRESPO, Marcelo MARTÍ, Damián SCHERLIS y Darío ESTRIN  | Poster    |
| H2               | CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS MODELO DE MEMBRANA DE INTERÉS BIOLÓGICO POR CALORIMETRÍA Y MICROSCOPIA DE FUERZA ATÓMICA   | D. C. CARRER <sup>Ø</sup> , E. M. PATRITO <sup>#</sup> y B. MAGGIO <sup>Ø</sup>                                  | Poster    |
| H3               | ACTIVIDAD FOTODINÁMICA DE PORFIRINAS CATIÓNICAS EN SISTEMA BIOMIMÉTICOS  | M. Débora E. Lazzeri y Edgardo N. Durantini  | Poster    |
| H4               | EFFECTO FOTODINAMICO DE METALO 5-(4-CARBOXIFENIL)-10,15,20-TRIS(4-METILFENIL) PORFIRINAS SOBRE LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICO | Inés Scalise y Edgardo N. Durantini  | Poster    |
| H5               | PARÁMETROS DE INFLUENCIA EN LA DETECCIÓN DE NAFTALENO POR BIOLUMINESCENCIA   | Valdman, E. <sup>1,2</sup> ; Leite, S.G.F. <sup>1</sup> ; Valdman, B. <sup>1</sup> ; Battaglini, F. <sup>2</sup> | Poster    |
| H6               | REACCION DEL OXIDO NITRICO CON $[Fe^{III/II}(CN)_5H_2O]^{2-/3-}$ ESTUDIO CINÉTICO Y MECANÍSTICO.                       | Federico Roncaroli <sup>ab*</sup> , José A. Olabe <sup>a</sup> y Rudi van Eldik <sup>b</sup> .                   | Oral      |
| H7               | ESTUDIO TEORICO DE LA INTERACCION VAPOR DE AGUA - QUITOSANO  | M.L.Ferreira, G.A. Alimenti, M.E.Gschaider, V.Pedroni, P.C.Schulz  | Poster    |
| H8               | EFFECTO DE AZÚCARES SOBRE LA ESTABILIDAD DE VESÍCULAS GIGANTES   | M.Florencia Mazzobre, Ariel Feo Mourelle, M.Victoria Román y Horacio Corti                                       | Poster    |

|      |   |  |        |
|------|---|--|--------|
| H9   | EFEECTO DE AZÚCARES SOBRE LA ESTABILIDAD DE VESÍCULAS GIGANTES  | M. Florencia Mazzobre, Ariel Feo Mourelle, M. Victoria Román y Horacio Corti   | Poster |
| H10  | COMPORTAMIENTO VOLTAMÉTRICO DE MONOCAPAS DE FOSFOLÍPIDOS ADSORBIDAS SOBRE MERCURIO                          | S. H. Almaleck* E. A. Disalvo* y G. J. Gordillo <sup>o</sup>   | Poster |
| III1 | GELES OBTENIDOS A PARTIR DE AISLADOS PROTEICOS OBTENDOS POR CRIOPRECIPITACION                               | GRAU#♦, G., LOPEZ#, B.; SORGENTINI*♦, D.   | Poster |
| H12  | GELES OBTENIDOS A PARTIR DE AISLADOS PROTEICOS OBTENDOS POR CRIOPRECIPITACION                               | GRAU#♦, G.; LOPEZ#, B.; SORGENTINI*♦, D.   | Poster |
| H13  | CAPAS DE BIORECONOCIMIENTO PREPARADAS POR DEPOSICIÓN DE QUITOSANO Y ADN SOBRE SUPERFICIES DE ORO            | M. L. PEDANO, L. MARTELL <sup>1</sup> , J. DESBRIERES <sup>2</sup> , P. DUMMY <sup>2</sup> , P. LABBÉ <sup>2</sup> , R. CALEMCZUK <sup>1</sup> y G. A. RIVAS   | Poster |
| H14  | DETERMINACION DE GRUPOS FENOLICOS EN ACIDOS HUMICOS MEDIANTE UN BIOELECTRODO AMPEROMETRICO                  | V. Paz <sup>1</sup> , S. Ceppi <sup>2</sup> , M. I. Sánchez de Pinto <sup>1</sup> y V. Solis <sup>3</sup>  | Poster |
| H15  | CINÉTICA DE ADSORCIÓN-DESORCIÓN DE ALBÚMINA SÉRICA BOVINA SOBRE SUPERFICIES DE SÍLICA.                      | Laura E. Valenti, Carla E. Giacomelli, Carlos P. De Pauli  | Poster |
| H16  | CINÉTICA DE BIOSORCIÓN DE Cu(II) Y Zn(II) POR <i>Ulva</i> sp.   | M. M. Areco, E. Valdman <sup>o</sup> y M. dos Santos Afonso  | Poster |
| H17  | RELACION CUANTITATIVA ESTRUCTURA ACTIVIDAD DE DERIVADOS N-ÓXIDOS DE 1,2,5 OXADIAXOL CON ACTIVIDAD HERBICIDA | Luciana A. Fernandez <sup>1</sup> , Marisa R. Santo <sup>1</sup> , Mario Reta <sup>1</sup> , Liliana Giacomelli <sup>1</sup> , Rosa Cattana <sup>1</sup> , Juana J. Silber <sup>1</sup> , Hugo Cerecetto <sup>2</sup> , Mercedes Gonzales <sup>2</sup> | Poster |
| H18  | DISOLUCIÓN DE METALES EN MEDIOS BIOLÓGICOS Y CULTIVOS CELULARES   | M.C. Cortizo <sup>1,2</sup> , A.M. Cortizo <sup>2</sup> and M. Fernández L. de Mele <sup>1</sup>   | Oral   |
| H19  | AUMENTO DE LA EFICACIA DE UN BIOCIDO EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO                                     | Mónica F.L. de Mele <sup>1</sup> y Sandra G. Gómez de Saravia <sup>2</sup>   | Oral   |
| H20  | ESTUDIO ELIPSOMÉTRICO DE PELÍCULAS DE LÍPIDOS TRANSFERIDAS A CARBONO VÍTREO.                                | N. Wilke, A. M. Baruzzi, M. A. Perez, M. Lopez Teijelo.  | Poster |
| H21  | ELIMINACIÓN DE ANION SUPEROXIDO POR FLAVONOLES NATURALES  | M.V. Rigo, M.P. Montaña, N. B. Pappano y N. B. Debattista  | Poster |

|     |   |   |        |
|-----|---|---|--------|
| H22 | SINTESIS, CARACTERIZACIÓN Y BIOACTIVIDAD DE COMPLEJOS QUE FOTOLIBERAN BIOMOLECULAS                                | L. Zayat, P. Albores, C. Calero, M. Giombini, B. Bertineti, L. Varadlo y <u>R. Etchenique</u>   | Poster |
| H23 | ESTUDIOS SIMULTANEOS DE IMPEDANCIA ELECTROACUSTICA Y ELIPSOMETRIA.  | <u>Leonardo Zayat</u> , Pablo Albores, Martin Habif, Mariano Giombini, Ricardo Cabrera, Roberto Etchenique y Luis M.Baraldo.  | Oral   |
| H24 | DESNATURALIZACIÓN DE PROTEÍNAS EN PRESENCIA DE LIGANDOS: TRATAMIENTO TEÓRICO DE SISTEMAS ACOPLADOS                | Manuel A. Pérez <sup>#</sup> , <u>Roberto Etchenique<sup>&amp;</sup></u> , Manuel Lopez Teijelo <sup>#</sup> .  | Oral   |
| H25 | DETERMINACIÓN DEL TIPO DE INHIBICIÓN PRODUCIDO POR FLAVONOIDES HIDROXILADOS SOBRE XANTINA OXIDASA                 | <u>M.S. Celej<sup>a</sup></u> , S.A. Dassi <sup>b</sup> , G.D. Fidelio <sup>a</sup>   | Poster |
| H26 | ESTUDIO ESTRUCTURAL, VIBRACIONAL Y TERMODINÁMICO DE FOSFATOS Y ESTERES FOSFATOS                                   | F. MANZANO <sup>1</sup> , <u>S. DIAZ<sup>1</sup></u> , S. BRANDAN <sup>1</sup> , A. BEN ALTABEF <sup>1</sup> y E. A. DISALVO <sup>2</sup>                           | Poster |
| H27 | LÁTEX CARBOXILADOS PARA SOPORTE DE BIOMOLÉCULAS. SÍNTESIS CONTROLADA, CARACTERIZACIÓN Y ADSORCIÓN DE BSA          | <u>G. T. Castro</u> , J. L. Vázquez Rodríguez (*), S. E. Blanco   | Poster |
| H28 | ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA INTERACCIÓN VAPOR DE AGUA – QUITOSANO  | G.A.ALIMENTI <sup>2</sup> , V.I. PEDRONI <sup>2</sup> , M.E. GSCHAIDER <sup>2</sup> , M.L. FERREIRA <sup>1</sup> , P.C. SCHULZ <sup>2</sup> , M.E.RAPP <sup>3</sup> | Poster |
| H29 | ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN VAPOR DE AGUA - QUITOSANO   | M.L.FERREIRA <sup>1</sup> , G.A.ALIMENTI <sup>2</sup> , M.E.GSCHAIDER <sup>2</sup> , V.PEDRONI <sup>2</sup> , P.C.SCHULZ  | Poster |
| H30 | ESTUDIO CINÉTICO Y TERMODINÁMICO DE LA REMOCIÓN DE METALES PESADOS CON PELLETS DE QUITOSANO – PECTINATO DE CALCIO | M. S. RODRIGUEZ <sup>1</sup> , <u>A. L. DEBBAUDT<sup>1</sup></u> , M. E. GSCHAIDER <sup>1</sup> , M. L. FERREIRA <sup>2</sup>                                       | Poster |
| H31 | RELACIÓN ENTRE EL GRADO DE ACETILACIÓN Y LA CONFORMACIÓN DEL QUITOSANO EN SOLUCIÓN                                | <u>V.PEDRONI</u> , M.E.GSCHAIDER, P.C.SCHULZ  | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| H32 | RELACION ENTRE EL GRADO DE ACETILACION Y LA CONFORMACION DEL QUITOSANO EN SOLUCION. | V PEDRONI,<br>M.E.GSCHAIDER,<br>P.C.SCHULZ | Poster |
|-----|---|--|--------|

H 1

## DESARROLLO Y APLICACIÓN DE UN NUEVO CÓDIGO QM-MM BASADO EN UN ESQUEMA DFT CON BASES NUMÉRICAS

**Alejandro CRESPO, Marcelo MARTÍ, Damián SCHERLIS y Darío ESTRIN**  
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física / INQUIMAE,  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad  
Universitaria, Pabellón II, C1428EHA, Buenos Aires, Argentina.  
e-mail: alec@q1.fcen.uba.ar

El presente trabajo está basado en el desarrollo de un nuevo esquema QM-MM, aplicable a sistemas con un gran número de átomos. Este tipo de sistemas, combina una descripción mecano-cuántica (QM) del soluto, cuyas propiedades químicas y estructurales se ven modificadas por el solvente, tratado bajo la mecánica molecular (MM). Típicos ejemplos de estos sistemas son la catálisis enzimática y el estudio de solutos en fases condensadas.

Con tal fin, hemos desarrollado un nuevo código QM-MM cuyo costo computacional es menor que el asociado con esquemas tradicionales. Para ello hemos introducido al programa SIESTA, la interacción con el solvente, tanto agua TIP3P, como un entorno proteico, basado en el campo de fuerza AMBER.

Por último presentamos las primeras aplicaciones de dicho esquema, principalmente los equilibrios ácido-base de amino ácidos en solución, como también aplicaciones a sistemas proteicos.

H 2

## CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS MODELO DE MEMBRANA DE INTERÉS BIOLÓGICO POR CALORIMETRÍA Y MICROSCOPIA DE FUERZA ATÓMICA

**D. C. CARRER<sup>o</sup>, E. M. PATRITO y B. MAGGIO<sup>o</sup>**

<sup>o</sup>Departamento de Química Biológica – CIQUIBIC y Departamento de Fisicoquímica - INFIQC, Facultad de Ciencias Químicas - CONICET, Universidad Nacional de Córdoba. (5000) Córdoba.

E-mail: dcarrer@dqf.fcq.unc.edu.ar

El sistema bajo estudio es la membrana formada por el fosfolípido simétrico dimiristoilfosfatidilcolina (DMPC) y sus mezclas con un esfingolípido asimétrico, C8Ceranida (C8Ccr).

El diagrama de fases calorimétrico indica la coexistencia de fases a temperaturas por debajo de la temperatura de comienzo de la transición gel-líquido cristalino, y la posible formación de un "compuesto" a concentraciones de C8Ccr cercanas a los 30 moles%.

La caracterización por Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) se realizó en bicapas soportadas sobre mica, bajo agua, y obtenidas a partir de la incubación de la mica limpia en presencia de liposomas unilamelares grandes (LUVs). La variación de la temperatura permitió observar la aparición de dominios de fase fluida en una matriz de fase gel en muestras del fosfolípido puro. Se caracterizó también el régimen de fuerzas suficientes para remover la bicapa de lípido y para producir desgaste de la mica.

H 3

### ACTIVIDAD FOTODINÁMICA DE PORFIRINAS CATIÓNICAS EN SISTEMA BIOMIMÉTICOS

**M. Débora E. Lazzeri y Edgardo N. Durantini**

**Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto**

**Agencia Postal N° 3, 5800 Río Cuarto**

**E-mail: edurantini@exa.unrc.edu.ar**

Los macrociclos tetrapirrólicos presentan aplicaciones biomédicas específicas, particularmente en el campo de la detección y tratamientos de tejidos neoplásicos. Las estructuras moleculares derivadas de porfirinas catiónicas han sido utilizadas para fotoinducir la inactivación directa de bacterias Gram-negativo sin la presencia de un agente adicional permeabilizante de la membrana. Esta aplicación no oncológica es de considerable importancia en la desinfección de fluidos biológicos, agua y sangre, principalmente de microorganismos resistentes. En estos sistemas el agente sensibilizador es incorporado en las células y la posterior iluminación del área afectada con luz visible conduce a la inactivación de las bacterias. La producción de oxígeno molecular singlete  $O_2(^1\Delta_g)$  aparenta ser la principal especie involucrada del mecanismo de fotoreacción, sin embargo este proceso depende del sensibilizador, los sustratos y la naturaleza del medio. La combinación de grupos lipofílicos y catiónicos pueden incrementar la incorporación del agente en las bacterias. Con este motivo fue sintetizada 5-(4-trifluorometilfenil)-10,15,20-tris(4-trimetilamoniofenil) porfirina. Esta estructura combina tres grupos trimetilamomo y un grupo trifluorometilo en la periferia del macrociclo tetrapirrólico, lo cual aporta un carácter anfífilico a ala estructura. Estudios espectroscópicos de absorción y fluorescencia indican que la porfirina esta principalmente en forma monomérica en medios homogéneos polares y sistemas organizados. El rendimiento cuántico de fluorescencia es de  $\sim 0.1$ . La producción de  $O_2(^1\Delta_g)$  fue evaluada mediante la descomposición de sustratos biológicamente activos. Los estudios muestran que esta porfirina presenta propiedades adecuadas para su utilización como agente fotodinámico en la inactivación de sistemas biológicos.

H 4

### EFFECTO FOTODINAMICO DE METALO 5-(4-CARBOXIFENIL)-10,15,20-TRIS(4-METILFENIL) PORFIRINAS SOBRE LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICO

**Inés Scalise y Edgardo N. Durantini**

**Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto**

**Agencia Postal N° 3, 5800 Río Cuarto**

**E-mail: edurantini@exa.unrc.edu.ar**

Los compuestos derivados de macrociclos tetrapirrólicos presentan considerable interés en el desarrollo de agentes fototerapéuticos para tratamientos de enfermedades neoplásicas mediante terapia fotodinámica (PDT). Dos de los requisitos fotoquímicos de estos agentes son absorción en la región visible del espectro y una producción eficiente de oxígeno molecular singlete,  $O_2(^1\Delta_2)$ . En este trabajo fue desarrollado un procedimiento conveniente para la síntesis de 5-(4-carboxifenil)-10,15,20-tris(4-metilfenil) porfirina a partir de *meso*-(4-metilfenil) dipirrometano. La formación de los complejos con metales (Zn, Ni, Cu y Pd) fue utilizado para producir cambios en las bandas  $Q$  de absorción. Los complejos con Cu, Ni y Pd absorben por debajo de 600 nm, mientras que la base libre ( $H_2$ ) y el complejo con Zn absorben a  $\lambda > 600$  nm. Los rendimientos cuánticos de fluorescencia ( $\phi_f$ ) siguen el orden  $H_2 > Zn > Pd$ , mientras que la emisión no fue detectada para los complejos con Cu y Ni. La producción de  $O_2(^1\Delta_2)$  sigue el orden:  $Pd > Zn > base libre$ . Este efecto no fue detectado para Cu y Ni. El efecto fotodinámico fue comparado en sistemas modelos biomimético formados por una enzima (ureasa) en agua y en micelas inversas de AOT (dioctilsulfosuccinato de sodio). La actividad enzimática fue evaluada a distintas dosis de irradiación con luz visible. La inactivación de ureasa sigue el orden:  $Pd > Zn > base libre$ , mientras que la actividad permanece elevada para Ni y Cu. La inactivación enzimática correlaciona con la producción de  $O_2(^1\Delta_2)$  del sensibilizador indicando que un mecanismo de fotoreacción tipo II estaría principalmente involucrado en estos procesos.

H 5

## PARÁMETROS DE INFLUENCIA EN LA DETECCIÓN DE NAFTALENO POR BIOLUMINESCENCIA

Valdman, E.<sup>1,2</sup>; Leite, S.G.F.<sup>1</sup>; Valdman, B.<sup>1</sup>; Battaglini, F.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Depto Eng. Bioq., Escola de Química, UFRJ - Rio de Janeiro, Brasil

<sup>2</sup>INQUIMAE, DQIAQF FCEN-UBA; Cdad. Universitaria, Pab.2 -1428 - Buenos Aires, Argentina (email: [battaglini@qi.fcen.uba.ar](mailto:battaglini@qi.fcen.uba.ar))

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) son compuestos carcinogénicos para seres humanos y otros organismos vivos. En general, la remoción de estos hidrocarburos de sitios contaminados por técnicas químicas convencionales no lleva en consideración los verdaderos efectos biológicos y ecológicos de los PAHs. El uso de sistemas biológicos, además de integrar cambios en toxicología y biodisponibilidad, incluye ventajas como alta sensibilidad, bajo costo y respuesta rápida. Un novedoso mecanismo para la detección de la contaminación por hidrocarburos es la bioluminiscencia obtenida a través de microorganismos modificados genéticamente, donde hay un aumento en la producción de luz en respuesta a la presencia del contaminante específico. Con este objetivo se desarrolló un ensayo para naftaleno con la bacteria bioluminescente *Pseudomonas fluorescens* HK44. Después de alcanzar la fase estacionaria, las células fueron centrifugadas y los *pellets* resuspendidos para obtener la concentración celular deseada. Para el monitoreo de la bioluminiscencia en tiempo real se utilizó una celda de flujo con un detector PTI 814. En este trabajo se evaluó el efecto del oxígeno disuelto y de la presencia de nitrato en el medio de reacción para detectar el hidrocarburo. Ensayos preliminares demostraron la capacidad de esta cepa en detectar PAHs en efluentes reales contaminados, mostrando el gran potencial de esta nueva técnica de detección.

H 6

## REACCION DEL OXIDO NITRICO CON $[\text{Fe}^{\text{III/II}}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}]^{2-/3-}$ ESTUDIO CINÉTICO Y MECANÍSTICO.

ORAL

Federico Roncaroli<sup>ab\*</sup>, José A. Olabe<sup>a</sup> y Rudi van Eldik<sup>b</sup>.

<sup>a</sup>INQUIMAE-FCEN, UBA, Pabellón II, Ciudad Univ., Bs. As., Argentina. <sup>b</sup>Instituto de Química Inorgánica, Universidad de Erlangen-Nürnberg, 91058 Erlangen, Alemania.

\*e-mail: [fronca@qi.fcen.uba.ar](mailto:fronca@qi.fcen.uba.ar).

La coordinación del radical NO en centros metálicos es poco conocida. Este modo reactivo del NO es crucial en procesos fisiológicos diversos, asociado con su química redox. El NO reacciona con  $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}]^{2-}$  produciendo  $[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]^{2-}$ , nitroprusiato (NP), cuantitativamente. La constante de segundo orden es  $0,252 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$  (pH 3,0; T 25,5 °C; I 0,1 M) y los parámetros de activación:  $\Delta H^\ddagger = 52 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta S^\ddagger = -82 \text{ J/K mol}$  y  $\Delta V^\ddagger = -13,9 \text{ cm}^3/\text{mol}$ . Esto no concuerda con un mecanismo  $I_a$ , aceptado para las sustituciones en este sistema. Al detectar la presencia de  $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}]^{3-}$  como intermediario de reacción, proponemos que  $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}]^{2-}$  es reducido por NO, por un mecanismo de esfera externa limitante. El complejo de Fe(II) reacciona rápidamente con el nitrito generado en el paso anterior para dar  $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_5\text{NO}_2]^{3-}$ , que forma rápida e irreversiblemente NP. Además estudiamos la reacción del NO con  $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}]^{3-}$ . El producto de sustitución  $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_5(\text{NO}^\ominus)]^{3-}$  fue detectado a pH > 9. La constante de segundo orden para la reacción es  $250 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ , consistente con etapa lenta de disociación de agua seguida por coordinación rápida de NO. Los parámetros de activación  $\Delta H^\ddagger = 70 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta S^\ddagger = 34 \text{ J/K mol}$ , también sugieren un mecanismo  $I_a$ . Esta reacción se complica en exceso de NO, con probable dismutación del mismo. Finalmente, se reporta acerca de la disociación de NO del  $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_5(\text{NO}^\ominus)]^{3-}$ , un proceso relevante al mecanismo de la acción hipotensiva del NP. Esta reacción es complicada por la reacción de labilización de cianuros, dependiente del pH.

H 7

## ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN VAPOR DE AGUA - QUITOSANO

**M.L.FERREIRA<sup>1</sup>, G.A.ALIMENTI<sup>2</sup>, M.E.GSCHAIDER<sup>2</sup>, V.PEDRONI<sup>2</sup>, P.C.SCHULZ<sup>2</sup>**  
**1-PLAPIQUI-UNS-CONICET, Camino La Carrindanga Km 7, CC 717, 8000, B.Blanca**  
**2-UNS, Departamento de Química, Lab. Físicoquímica, Av. Alem 1253, 8000, B.Blanca**  
**E-mail: pedroni@criba.edu.ar**

Utilizando métodos de mecánica molecular (MM2) y métodos semiempíricos de cálculo (PM3) dentro del software Chem 3 D 5.0 Ultra (Cambridge Soft) se estudió la adsorción de agua en modelos de quitosano en polvo y quitosano como membrana con distintos grados de desacetilación. Los modelos superficiales considerados fueron varios: cadena de 4 monómeros (aislada), 2 cadenas de 4 monómeros con puente de H corto (longitud 2.4 Å) o puente de H obtenido por minimización (2.8-3.0 Å), intra e intermolecular y 3 cadenas de 4 monómeros con puente de H. Los resultados permiten concluir que el modelo representativo de la adsorción de agua es el de 2 cadenas de 4 monómeros con puente de H de longitudes entre 2.8 y 3 Å. En el modelo de membrana de quitosano, existen moléculas de agua entre las cadenas de 4 monómeros de quitosano. También se consideró la acetilación parcial, reemplazando un grupo NH<sub>2</sub> por un grupo NHCOCH<sub>3</sub>. Las moléculas de agua a adsorber se consideraron como monómeros, dímeros y tetrámeros en fase vapor. Se obtuvieron energías estéricas y  $\Delta H_{\text{formación}}$  para los sistemas modelo-agua en las distintas conformaciones evaluadas. Mientras que la energía estérica disminuye al comparar el modelo de quitosano polvo-membrana y agua (monómero o dímero) infinitamente alejados con agua adsorbida sobre los distintos sitios de quitosano, los cambios entálpicos indican que la reacción es endotérmica, con entalpías de adsorción entre 12-42 kJ/mol por monómero de agua adsorbido.

En el caso del modelo que incluye un grupo acetilado la adsorción de agua se encuentra termodinámicamente favorecida.

H 8

## EFEECTO DE AZÚCARES SOBRE LA ESTABILIDAD DE VESÍCULAS GIGANTES

**M.Florencia Mazzobre, Ariel Feo Mourelle, M.Victoria Román y Horacio Corti**  
**Unidad de Actividad Química, CNEA, Av. Gral. Paz 1499, (1650) San Martín, Bs.As.**  
**e-mail: mazzobre@cnea.gov.ar**

El empleo de azúcares ha sido ampliamente utilizado en la conservación de material biológico, productos farmacéuticos o cosméticos. El estudio de la estabilidad y propiedades físicas en sistemas modelo de membranas, donde la composición lipídica y las condiciones del medio (como temperatura, fuerza iónica, pH) pueden controlarse provee información útil acerca del comportamiento de estas estructuras frente a factores externos permitiendo lograr una mejor comprensión de procesos citológicos.

En el presente trabajo se estudió el efecto del estrés térmico sobre la estructura de membranas que forman parte de vesículas gigantes en presencia de azúcares crioprotectores. Las vesículas gigantes (diámetro 40-100  $\mu\text{m}$ ) empleadas como modelos de membranas biológicas fueron generadas por el método de electroformación utilizando palmitoil-oleoilphosphatidil-colina (POPC) en soluciones acuosas conteniendo sacarosa o trehalosa.

Los cambios de forma y tamaño, ruptura, etc. de vesículas individuales se determinaron mediante análisis de imágenes con un microscopio óptico de contraste de fase acoplado a una platina termostaticada. Las soluciones donde se encuentran suspendidas las vesículas se pueden congelar en condiciones controladas que simulan diversos regímenes de enfriamiento. La celda permite también estudiar el efecto de campos eléctricos sobre la estructura de la vesícula y determinar propiedades mecánicas de la misma. En este trabajo se presentan resultados preliminares que ilustran el efecto de los disacáridos sobre estas propiedades.

Dado que la presencia del azúcar en la interfase membrana-solución y dentro de la propia estructura de la membrana depende de la lipofilia, se determinó el coeficiente de partición de los disacáridos estudiados entre octanol y agua. Este coeficiente permite establecer una escala relativa de la naturaleza lipofílica/hidrofílica de diferentes sacáridos y su relación con el efecto de los mismos sobre el estrés térmico. La cuantificación de los azúcares en las fases octanol y agua se realizó mediante un método enzimático que permitió detectar concentraciones en la fase orgánica del orden de 1 mM.

H 9

## RELACIÓN ENTRE EL GRADO DE ACETILACIÓN Y LA CONFORMACIÓN DEL QUITOSANO EN SOLUCIÓN

**V. PEDRONI, M.E. GSCHAIDER, P.C. SCHULZ**

UNS, Departamento de Química, Lab. de Físicoquímica, Av. Alem 1253, 8000, B. Blanca

E-mail: [pedroni@criba.edu.ar](mailto:pedroni@criba.edu.ar)

La quitina está compuesta por unidades de  $\beta$ -D-glucosamina con un grado variable de *N*-acetilación (GA). Mientras que la quitina es un material insoluble en solución acuosa, el quitosano, la forma parcialmente acetilada de la quitina, es soluble en solución diluida de diversos ácidos. Existe una controversia sobre la conformación que adoptan las moléculas de quitosano en solución, y hay datos contradictorios sobre la influencia del grado de acetilación (GA) sobre dicha conformación. En este trabajo se empleó un método de fijación de estructuras lábiles en solución, tales como micelas de tensioactivos catiónicos, para luego observarlas en el microscopio electrónico por transmisión. Este método consiste en el teñido mediante acetato de uranilo, que además fija la estructura existente en solución, y hasta donde sabemos, no ha sido anteriormente aplicado al quitosano para este fin. El ión uranilo tiene una ligera preferencia por complejarse con ligandos con nitrógeno, y el quitosano es un polielectrolito catiónico. Pudo así verificarse directamente que las moléculas de quitosano estudiadas se comportan como cadenas de copolímero en bloque, donde bloques de quitina acetilada prácticamente por completo, en forma de aglomerados globulares ("micelas"), están unidos por fibras de poliglucosamina prácticamente desacetilada, totalmente estiradas por la repulsión electrostática entre los grupos catiónicos cargados. El conjunto debe comportarse hidrodinámicamente como una estructura tipo "gusano", lo que ya ha sido informado en literatura. Se encontró una relación lineal inversa tanto entre longitud de cadena y tamaño de micela y el GA, la cual puede explicarse sobre la base de la estructura de las regiones acetilada y desacetilada.

H 10

## COMPORTAMIENTO VOLTAMÉTRICO DE MONOCAPAS DE FOSFOLÍPIDOS ADSORBIDAS SOBRE MERCURIO

**S. H. Almaleck\*, E. A. Disalvo\* y G. J. Gordillo<sup>o</sup>**

\*Laboratorio de Físicoquímica de Membranas Lipídicas, FFyB, UBA

<sup>o</sup>DQIAQF, INQUIMAE, FCEN – Universidad de Buenos Aires. C. Universitaria.

Pabellón II. Buenos Aires (1428). Email: [gabriel@qi.fcen.uba.ar](mailto:gabriel@qi.fcen.uba.ar)

Las monocapas de fosfolípidos adsorbidas sobre electrodos presentan alta estabilidad mecánica, resistencia a altos campos eléctricos y pueden ser adecuadamente caracterizadas a través de su comportamiento capacitivo y voltamperométrico.

El objetivo de este trabajo es establecer diferencias en la respuesta voltamétrica de diferentes tipos de fosfolípidos y analizar la influencia que tiene sobre la misma el estado de fase y los grupos polares específicos, éster, carbonilos, colinas y etanolaminas. Se compararon voltagramas realizados con monocapas de dimiristoilfosfatidilcolina (DMPC), dimiristoilfosfatidil etanolamina (DMPE), ditetradecilfosfatidilcolina (DEterPC) y ditetradecilfosfatidil etanolamina (DieterPE) a 4°C y a 25°C, adsorbidas sobre mercurio. Se efectuaron barridos lineales de potencial en el intervalo (+0,1V, -1,5V) con velocidades comprendidas entre 1V/s y 10V/s, modificando la relación entre el número de moles adsorbidos y el área de electrodo. La DMPC en estado fluido presenta tres picos característicos en la zona catódica, los cuales desaparecen cuando la monocapa pasa a fase gel. Este comportamiento es independiente de la presencia de carbonilos. La DMPE en estado gel presenta un solo pico desplazado hacia la zona anódica el cual también es independiente de la presencia de carbonilos. Se analiza el comportamiento de los picos característicos en función de la temperatura y del cubrimiento superficial.

H 11

### GELES OBTENIDOS A PARTIR DE AISLADOS PROTEICOS OBTENDOS POR CRIOPRECIPITACION

GRAU#♦, G.; LOPEZ#, B. ; SORGENTINI\*♦, D.

#Instituto de Ciencias Químicas, Facultad de Agronomía, UNSE, Avda Belgrano 1912, 4200-Santiago del Estero. ♦CIDCA-CONICET. \* Departamento de Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, calle 47 y 115, 1900-La Plata.  
E-mail ggrau unse.edu.ar

La textura de diversos alimentos depende de una estructura relativamente rígida obtenida a través de la gelificación térmica de las proteínas componentes. La habilidad de formar geles inducidos por calentamiento es una de las más importantes propiedades funcionales de las proteínas de soja en los sistemas alimentarios.

El objetivo de este trabajo fue determinar la capacidad de gelificación de aislados proteicos de soja y estudiar las propiedades reológicas cuando se los enriquece en fracción IIS alterando el proceso de obtención del aislado nativo (AN) por modificación del pH de precipitación ácida a pH 5.6 (AE5.6) o pH 5.8 (AE5.8) y adición de una etapa de crioprecipitación (16hs a 4°C).

Se prepararon geles a partir de dispersiones de aislados proteicos de soja al 10 y 12% p/p, las cuales fueron tratadas térmicamente a 90°C durante 30 y 60 minutos. Las medidas reológicas se llevaron a cabo en un reómetro Haake CV20 usando un sensor de platos paralelos con una separación de 1mm. La dispersión se colocó sobre el plato inferior el cual se mantuvo a 20°C. Los datos experimentales se obtuvieron por registro de  $G'$  (módulo de almacenamiento)  $G''$  (módulos de pérdida),  $G^*$  (módulos complejo) y  $\tan \delta(G''/G')$  como una función de la oscilación de la frecuencia. La contribución elástica a la estructura formada se evidencia con el aumento de  $G'$  con el tiempo de calentamiento y con la concentración que se observa más pronunciado en AE5.6.

H 12

### ESTUDIO CINÉTICO Y TERMODINÁMICO DE LA REMOCIÓN DE METALES PESADOS CON PELLETS DE QUITOSANO – PECTINATO DE CALCIO

M. S. RODRIGUEZ<sup>1</sup>, A. L. DEBBAUDT<sup>1</sup>, M. E. GSCHAIDER<sup>1</sup>, M. L. FERREIRA<sup>2</sup>  
1- LIBAQ, Dpto. de Química, UNS, Av. Alem 1253 (8000) Bahía Blanca

2- PLAPIQUI – UNS-CONICET. Camino La Carrindanga, Km 7 CC 717 (8000) B. Bca.  
E-mail: debbaudt @criba.edu.ar

Los metales pesados constituyen los contaminantes en el agua de mar y desechos industriales más peligrosos para el medio ambiente. Las bajas concentraciones en que se encuentran en estos medios dificultan su remoción por técnicas sencillas convencionales. El objetivo de este trabajo es el estudio de la utilización de un bioadsorbente en la eliminación de tres metales pesados seleccionados. Los pellets de quitosano-pectinato de calcio obtenidos en nuestro laboratorio constituyen un excelente sistema para la eliminación de los mismos. En este trabajo presentamos el estudio de la cinética de adsorción en un sistema en batch. La cinética de adsorción se puede explicar teniendo en cuenta dos etapas distintas: en primer lugar, una adsorción química superficial y luego, la difusión desde la superficie hasta el interior del pellet. La ecuación cinética que representa el proceso es una expresión parabólica. Los metales estudiados fueron Hg, Pb y Cd. El Pb y el Cd tienen un comportamiento cinético conforme a la ecuación parabólica, no así el Hg. Probablemente la diversidad de especies presentes en las condiciones de adsorción explican el comportamiento del Hg. Se presentaron también las isoterms de adsorción a distintas temperaturas, completando así el estudio termodinámico de los sistemas seleccionados. Dados los muy buenos resultados obtenidos, se concluye que los pellets de quitosano – pectinato de calcio constituyen un excelente adsorbente para la aplicación en la remoción de Pb, Hg y Cd en aguas industriales de desechos.

De esta forma constituye una potencial alternativa para futuras aplicaciones tecnológicas.

H 13

**CAPAS DE BIORECONOCIMIENTO PREPARADAS POR  
DEPOSICIÓN DE QUITOSANO Y ADN SOBRE  
SUPERFICIES DE ORO**

**M. L. PEDANO, L. MARTELL<sup>1</sup>, J. DESBRIERES<sup>2</sup>, P. DUMMY<sup>2</sup>, P. LABBÉ<sup>2</sup>, R.  
CALEMCZUK<sup>1</sup> y G. A. RIVAS**

**INFIQC. Departamento de Físico Química. Facultad de Ciencias Químicas. U. N. C.  
Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba. e-mail: grivas@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

**<sup>1</sup>Centre d'Énergie Atomique (CEA), Grenoble, France.**

**<sup>2</sup>Université Joseph Fourier-CNRS, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, Francia**

En esta comunicación se presenta una nueva capa de bio-reconocimiento preparada por deposición de dsADN y quitosano sobre superficies de oro tioladas. La caracterización se efectuó empleando espectroscopia de resonancia de plasmón superficial que permite caracterizar y monitorear la construcción de estructuras supramoleculares en tiempo real.

Los resultados indican que la formación de multicapas es altamente dependiente del grado de sustitución del quitosano y de la naturaleza de los sustituyentes. Se emplearon tres tipos de quitosanos, uno cuaternario sustituido en un 32,0 mol % por un crupo metilo y otros dos sustituidos en un 5,0 y un 25,0 mol % por un residuo de 8 átomos de carbono. La inmovilización más efectiva de dsADN se obtuvo usando un quitosano cuaternario debido a su carga positiva permanente. La incorporación de sustituyentes hidrofóbicos en la molécula de quitosano origina una cinética de adsorción más lenta. El sistema de multicapas demostró ser muy estable ya que después de 12 horas en solución "buffer" la curva de plasmón fue la misma que la obtenida en presencia de la estructura supramolecular recién preparada.

H 14

**DETERMINACION DE GRUPOS FENOLICOS EN ACIDOS  
HUMICOS MEDIANTE UN BIOELECTRODO  
AMPEROMETRICO**

**V. Paz<sup>1</sup>; S. Ceppi<sup>2</sup>; M. I. Sánchez de Pinto<sup>1</sup> y V. Solís<sup>3</sup>**

**<sup>1</sup>Inst.Cs.Qcas.-F.A yA-UNSE- <sup>2</sup>F.Cs.Agropecuarias-UNC- <sup>3</sup>Fac.Cs.Químicas-UNC  
Av. Belgrano (S) 1912-4200- Sgo. del Estero - Argentina**

**e-mail: inesdep@unse.edu.ar**

Las sustancias húmicas existentes en la materia orgánica de los suelos y abonos orgánicos, se forman en la naturaleza como resultado de procesos químicos y microbiológicos de policondensación y polimerización. Este conjunto de moléculas poliméricas contienen cantidades variables de grupos carboxílicos y fenólicos que le confieren propiedades características.

El objetivo de este trabajo es aplicar un electrodo enzimático amperométrico para la cuantificación de fenoles y polifenoles a la caracterización de ácidos húmicos (AH) extraídos de muestras de suelo y de compost de diferente procedencia.

El electrodo consiste en pasta de carbono modificada con peroxidasa de rábano (EC 1.11.1.7) y ferroceno como mediador redox, recubierto por una membrana de diálisis (cut off 12.000) para impedir la adsorción de macromoléculas orgánicas. El electrodo se sumerge en una solución que contiene concentraciones conocidas de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y peroxidasa. La señal analítica es la corriente de reducción estacionaria, a 0,1V vs Ag/AgCl/Cl<sup>-</sup>, proporcional a la concentración de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Dicha corriente disminuye frente al agregado de cantidades crecientes de una solución de concentración conocida (P/V) de AH. Se comparan los equivalentes de fenoles y polifenoles determinados amperométricamente (fracción oxidable) con los cuantificados por el método de Schinitzer y Gupta (titulación ácido-base potenciométrica). Se obtuvo una correlación positiva entre ambos valores, aunque la cantidad de equivalentes determinados amperométricamente es sensiblemente menor que la determinada por la titulación ácido-base. Estos resultados indican que sólo una pequeña fracción de los grupos fenólicos y polifenólicos presentes en las muestras serían oxidables por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> en presencia de peroxidasa.

H 15

### CINÉTICA DE ADSORCIÓN-DESORCIÓN DE ALBÚMINA SÉRICA BOVINA SOBRE SUPERFICIES DE SÍLICA.

**Laura E. Valenti, Carla E. Giacomelli, Carlos P. De Pauli**

**INFIQC, Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina.**

**valenti@mail.fcq.unc.edu.ar – giacomel@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

El objetivo de este trabajo es estudiar la cinética del ciclo de adsorción-desorción de albúmina sérica bovina (ASB) sobre superficies de sílica. El proceso de adsorción fue estudiado como función del pH (3, 4,8 y 7) y de la concentración de proteína. La desorción fue inducida por el agregado de dodecilsulfato de sodio (SDS), detergente iónico de carga negativa, a dos concentraciones (4 mM y 16 mM). La cinética del ciclo de adsorción-desorción fue seguida por reflectometría que permite seguir el proceso desde los primeros segundos. La cinética de adsorción muestra una fuerte influencia del pH y la concentración de ASB en solución. Se observa que a un pH igual al punto isoelectrico de la proteína (pH=4.8) la velocidad inicial y el valor de saturación son máximos para una dada concentración de ASB. Dentro del intervalo de concentraciones de ASB utilizado no se observaron diferencias en la velocidad inicial ni en la cantidad máxima adsorbida a pH 3 y 7. La dependencia con el pH indica que el proceso de adsorción no está determinado sólo por la atracción electrostática proteína-superficie, sino también por la conformación de la ASB y por la repulsión entre moléculas adsorbidas. El proceso de desorción inducido por el agregado de SDS se hace más lento cuando la proteína ha sido adsorbida a bajas concentraciones y con concentraciones menores del detergente, provocando una mayor resistencia al lavado por acción del surfactante. Sin embargo, en todos los casos se produce desorción total de la proteína dentro de los primeros minutos del proceso.

H 16

### CINÉTICA DE BIOSORCIÓN DE Cu(II) Y Zn(II) POR *Ulva* sp.

**M. M. Areco, E. Valdman<sup>#</sup> y M. dos Santos Afonso**

**DQIAQF, INQUIMAE, FCEyN, UBA, Cdad Universitaria – Pab. II – (C1428EHA)**

**Buenos Aires – e-mail: dosantos@qi.fcen.uba.ar.**

**<sup>#</sup> Depto Eng. Bioq., Escola de Química, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil**

El aumento de leyes ambientales más estrictas viene forzando a los investigadores a estudiar nuevas tecnologías para la remoción de metales pesados presentes en los efluentes. La biosorción, conocida como la sorción de metales pesados por materiales biológicos, surge como una alternativa potencial a las tecnologías convencionales que pueden ser costosas y no siempre efectivas.

Este trabajo tiene como objetivo verificar el comportamiento del alga marina *Ulva* sp., recogida de la costa atlántica, como biosorbente para remover metales pesados. Entre los metales comúnmente presentes en aguas contaminadas fueron seleccionados Cu(II) y Zn(II) y se implementó la biosorción con el objetivo de alcanzar los bajos límites establecidos para dichos metales. Después de lavada y seca, el alga fue triturada y adicionada a una solución sintética de Cu(II) o Zn(II), permaneciendo en constante agitación por 4 horas. La concentración de las muestras fue determinada colorimétricamente. Las medidas cinéticas fueron realizadas variando todos los parámetros de la solución: concentración del alga, de los metales y pH de la solución.

Los resultados experimentales nos permitieron evaluar el potencial del alga como biosorbente ya que su bajo costo es una gran ventaja para el uso comercial de esta nueva técnica. Otras algas también serán evaluadas para que se pueda identificar la mejor especie para tal fin.

H 17

**RELACION CUANTITATIVA ESTRUCTURA ACTIVIDAD  
DE DERIVADOS N-ÓXIDOS DE 1,2,5 OXADIAZOL CON  
ACTIVIDAD HERBICIDA**

**Luciana A. Fernandez<sup>1</sup>, Marisa R. Santo<sup>1</sup>, Mario Reta<sup>1</sup>, Liliana Giacomelli<sup>1</sup>, Rosa Cattana<sup>1</sup>, Juana J. Silber<sup>1</sup>, Hugo Cercetto<sup>2</sup>, Mercedes Gonzales<sup>2</sup>**

**1- Dpto. de Química. UNRC. Agencia Postal Postal N°3. 5800. Río Cuarto. Argentina, 2- Qca. Orgánica. Fac. de Química. UR, CC 1157, Montevideo, Uruguay; [msanto@exa.unrc.edu.ar](mailto:msanto@exa.unrc.edu.ar)**

La respuesta farmacológica de una droga surge del resultado de diferentes tipos de interacciones droga-receptor. Estas interacciones están relacionadas con las propiedades fisicoquímicas y estructurales de los compuestos interactuantes, por lo tanto es posible predecir o explicar el comportamiento biológico de estas moléculas a partir de sus propiedades.

En este trabajo se estudió la relación entre la actividad herbicida de una serie de nuevos N-óxidos de 1,2,5-oxadiazol y sus propiedades fisicoquímicas. Estos compuestos exhiben actividad fitotóxica, sobre la especie *Triticum aestivum*, a dosis menores que las usualmente utilizadas en herbicidas comerciales. Los requerimientos estructurales indican al grupo N-óxido como grupo activo ya que en ausencia del mismo se pierde la actividad observada.

Como índice de lipofiliidad se utilizó el logaritmo del factor de retención cromatográfico extrapolado a agua pura,  $\log k'_w$ . Los descriptores semiempíricos (polaridad, volumen molecular, densidad de carga) fueron calculados utilizando el método AM1. El potencial de reducción de los diferentes compuestos se determinó utilizando voltametría cíclica.

Los resultados obtenidos indican que la variación en la actividad biológica puede ser explicada predominantemente por los cambios en la lipofiliidad de los diferentes derivados. También se observa una importante dependencia de la variación en la actividad biológica con los cambios en las diferentes funcionalidades de los N-óxidos y sus propiedades electrónicas, cuantificadas mediante su correspondiente potencial de reducción.

H 18  
ORAL

**DISOLUCIÓN DE METALES  
EN MEDIOS BIOLÓGICOS Y CULTIVOS CELULARES**

**M.C. Cortizo<sup>1,2</sup>, A.M. Cortizo<sup>2</sup> and M. Fernández L. de Mele<sup>1</sup>**

**Universidad Nacional de La Plata, <sup>1</sup>INIFTA, C.C. 16 Suc.4, 1900 La Plata, Argentina.**

**E-mail: [mmele@inifta.unlp.edu.ar](mailto:mmele@inifta.unlp.edu.ar)**

**<sup>2</sup>Cátedra de Bioquímica Patológica, Facultad de Ciencias Exactas,  
47 esq 115, 1900 La Plata, Argentina**

Se ha comprobado que algunos iones metálicos producen efectos tóxicos sobre cultivos celulares cuando se adicionan en forma de sales a dichos medios. El estudio de dichos efectos es importante en relación a la biocompatibilidad de los materiales metálicos. En la situación clínica real los iones provienen de la disolución del biomaterial metálico y probablemente la biocompatibilidad dependa de la composición y de la velocidad de corrosión del mismo. Teniendo en cuenta que el cobre y la plata son dos de los componentes más corrosibles y tóxicos de los biomateriales se estudió la disolución de los mismos en distintos medios biológicos tales como: a) Dubelcco's Modified Eagle Medium (DMEM), b) cultivos de osteoblastos y c) en soluciones salinas de distinta composición en ausencia y presencia de proteínas provenientes del suero fetal bovino y albúmina humana. Se observaron también los efectos que la disolución de alambres de distintos materiales producía sobre la proliferación y diferenciación de los osteoblastos.

A través de la aplicación de técnicas potenciodinámicas de barrido de potencial se logró detectar una gran influencia de la presencia de proteínas sobre los procesos de disolución. Por otra parte, los osteoblastos mostraron modificaciones conformacionales y disminución en el número de células supervivientes, en el índice mitótico y en la actividad de la enzima fosfatasa alcalina.

**H 19  
ORAL**

**AUMENTO DE LA EFICACIA DE UN BIOCIDO  
EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO**

**Mónica F.L. de Mele<sup>1</sup> y Sandra G. Gómez de Saravia<sup>2</sup>**  
**INIFTA. C.C. 16, Suc. 4, (1900) La Plata, Argentina**  
<sup>1</sup>CONICET <sup>2</sup>CICPBA. E-mail: [mmele@inifta.unlp.edu.ar](mailto:mmele@inifta.unlp.edu.ar)

El glutaraldehído (GA) es ampliamente usado como agente antimicrobiano en distintas industrias y en la esterilización de instrumental médico y odontológico. La molécula de GA por su naturaleza bifuncional, puede formar puentes con las proteínas de la pared celular, impidiendo el normal metabolismo bacteriano. Se sabe que la efectividad del GA sobre las biopelículas bacterianas es menor que sobre las bacterias planctónicas. Con el objetivo de potenciar la acción del GA, se estudió el uso de un tratamiento mixto (campo eléctrico + GA) sobre biopelículas de *Pseudomonas fluorescens* (*P. fluorescens*) formadas en la superficie de un acero inoxidable. La aplicación del campo eléctrico es una metodología empleada para potenciar la eficacia de antibióticos en el campo de la medicina (efecto bioeléctrico). Las muestras de acero inoxidable con el biofilm formado se colocaron en: a) una solución de buffer de fosfatos; b) una solución de buffer de fosfatos con 100 ppm de GA y c) en una celda electroquímica aplicando una corriente continua de 0,4 mA entre un cátodo de acero inoxidable y un ánodo de platino, utilizando como electrolito una solución de buffer de fosfatos más 100 ppm de GA. En todos los casos se siguió el crecimiento de las biopelículas utilizando una técnica de microscopía óptica no invasiva y se enumeraron las bacterias a través de microscopía de epifluorescencia. Se compararon las características estructurales del biofilm y el número de bacterias formadoras del mismo luego de los tratamientos a), b) y c). Los resultados mostraron que el efecto biocida del GA se ve incrementado en presencia del campo eléctrico.

**H 20**

**ESTUDIO ELIPSOMÉTRICO DE PELÍCULAS DE LÍPIDOS  
TRANSFERIDAS A CARBONO VÍTREO**

**N. Wilke, A. M. Baruzzi, M. A. Perez, M. Lopez Teijelo.**  
**INFIQC - Dpto. de Fisicoquímica - Fac. de Cs. Químicas – Univ. Nacional de Córdoba.**  
**5000 Córdoba. Pabellón Argentina. Ala 1. Piso 2. Ciudad Universitaria**  
**e-mail: [wilke@mail.fcq.unc.edu.ar](mailto:wilke@mail.fcq.unc.edu.ar)**

Se estudiaron multicapas de galactocerebrósido (galcer) de tipo Langmuir-Blodgett (L-B) sobre un electrodo de carbono vítreo transferidas a diferentes presiones laterales. La elipsometría se utilizó para el estudio de estas películas tanto en aire como en solución acuosa. En medio acuoso, se realizó el estudio a circuito abierto y también se analizó el efecto de la aplicación un campo eléctrico variable. Se registraron los ángulos elipsométricos  $\Delta$  y  $\Psi$  luego de cada transferencia. Los resultados se interpretaron utilizando un modelo de película simple anisotrópica, de propiedades homogéneas.

Las medidas elipsométricas indican que las películas de galcer transferidas a carbono vítreo en aire son transparentes y anisotrópicas, con índices de refracción de  $1.528 \pm 0.009$  y  $1.70 \pm 0.04$  según las direcciones paralela y normal al sustrato, respectivamente. Ambos índices son independientes de la presión de transferencia. El espesor de cada capa de galcer transferida es de  $(5.1 \pm 0.6)$  nm indicando la formación de bicapas lipídicas. En solución de  $\text{NaNO}_3$ , la película también es anisotrópica pero con propiedades ópticas mucho más parecidas a las del agua, indicando hidratación. El espesor es de  $(5.7 \pm 0.3)$  nm. El ciclado potenciodinámico (entre  $-0.6$  V y  $+0.6$  V respecto  $\text{Ag}/\text{AgCl}/\text{Cl}_{3\text{M}}$ ) presenta una gran histeresis. Los cambios observados en  $\Delta$  y  $\Psi$  durante el barrido negativo se revierten durante el barrido positivo y pueden ser explicados considerando un aumento en la hidratación de las capas lipídicas.

H 21

## ELIMINACION DE ANION SUPEROXIDO POR FLAVONOLES NATURALES

**M.V.Rigo, M.P.Montaña, N.B.Pappano y N.B.Debattista**

**Area de Química-Física, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia,  
Universidad Nacional de San Luis - Chacabuco 917 – 5700 – San Luis.**

Correo electrónico: [ndeba@unsl.edu.ar](mailto:ndeba@unsl.edu.ar)

Los flavonoides, compuestos presentes en frutas, vegetales y bebidas, tienen diversos efectos antioxidantes y bioquímicos benéficos. En este trabajo se investigó la actividad de flavonoles naturales en la eliminación de radical superóxido. Los flavonoides investigados fueron, entre otros, 3,5,7,3',4'-(OH)<sub>5</sub>-flavona; 3-(CH<sub>3</sub>)-5,7,3',4'-(OH)<sub>4</sub>-flavona; 3,7-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-5,3',4'-(OH)<sub>3</sub>-flavona; 3,7,3'-(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-5,4'-(OH)<sub>2</sub>-flavona y 3,5,7,2',4'-(OH)<sub>5</sub>-flavona.

El anión superóxido fue generado enzimáticamente mediante el sistema hipoxantina-xantina oxidasa y fue detectado por el método del nitrito para diferentes concentraciones de flavonoide. Para cada uno de ellos se calculó, por regresión no lineal, el 25% de la concentración inhibitoria (IC<sub>25</sub>) correspondiente.

De los resultados obtenidos se pudo comprobar que la presencia de grupos OH en ciertas posiciones de la molécula juegan un rol preponderante en la actividad de eliminación de radical superóxido, siendo el OH de C7 el más importante, lo cual concuerda con resultados obtenidos previamente en nuestro grupo de trabajo. El alto valor de IC<sub>25</sub> observado para 3,5,7,2',4'-(OH)<sub>5</sub>-flavona se debería a la ausencia de OH en C3' y, fundamentalmente, a la torsión del anillo B como consecuencia de la presencia de un OH en la posición 2'.

H 22

## SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y BIOACTIVIDAD DE COMPLEJOS QUE FOTOLIBERAN BIOMOLECULAS

**Leonardo Zayat, Pablo Albores, Cecilia Calero, Mariano Giombini, Brenda Bertinetti,**

**Luis M.Baraldo y Roberto Etchenique**

**INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.**

**Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.**

**[baraldo@qi.fcen.uba.ar](mailto:baraldo@qi.fcen.uba.ar) [rober@qi.fcen.uba.ar](mailto:rober@qi.fcen.uba.ar)**

El uso de compuestos que fotoliberan biomoléculas es de gran interés en muchas áreas de la biología, dado que la irradiación con luz ofrece una forma poco invasiva y de gran resolución espacial y temporal de excitar células o estructuras subcelulares.

En particular, la utilización de "phototriggers" o "caged compounds" para liberar neurotransmisores o compuestos capaces de modificar la actividad neuronal es una de las más prometedoras técnicas para estudiar la circuitería de los sistemas nerviosos. Estos compuestos son generalmente moléculas orgánicas con un grupo fotosensible a las que se adosa la biomolécula a liberar.

En este trabajo, presentamos varios "caged compound" de diferentes biomoléculas, todos en base a un centro inorgánico coordinado. Se caracterizan los compuestos y se les mide la actividad biológica sobre neuronas específicas del ganglio de sanguijuela (*Hirudo medicinalis*).

Estos compuestos son muy versátiles, y se pueden sintonizar sus propiedades de manera de hacerlos compatibles con diferentes entornos o sistemas biológicos.

Los mismos pueden ser utilizados para la determinación de circuitería mediante un setup experimental de enfoque que se describe en otro trabajo en este congreso.

**H 23**  
**ORAL**

## **UN NUEVO SISTEMA EXPERIMENTAL PARA DETERMINACION DE CIRCUITERIA NEURONAL.**

**Leonardo Zavat, Pablo Albores, Martin Habif, Mariano Giombini, Ricardo Cabrera, Roberto Etchenique y Luis M. Baraldo.**

**INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.  
Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.  
baraldo@qi.fcen.uba.ar rober@qi.fcen.uba.ar**

En este trabajo se describe un sistema experimental para la determinación de circuitaria neuronal en base a los siguientes elementos:

1 - Una familia nueva de fotoliberadores de neurocompuestos a base de complejos de Rutenio que presentan grandes ventajas respecto a todas las familias existentes (baja energía de excitación, posibilidad de sintonización de la banda de absorción, de sus propiedades de solubilidad, de su potencial redox y de su afinidad química.

2 - Un setup experimental foto-electrofisiológico que utiliza un laser de Nd-YAG bombeado por semiconductor para enfocar un spot mediante una lente controlada por bobinas móviles en X e Y que permite ejecutar secuencias de pulsos con resolución espacial micrométrica y resolución temporal en los milisegundos.

**H 24**  
**ORAL**

## **ESTUDIOS SIMULTANEOS DE IMPEDANCIA ELECTROACUSTICA Y ELIPSOMETRIA.**

**Manuel A. Pérez<sup>#</sup>, Roberto Etchenique<sup>&</sup>, Manuel Lopez Teijelo<sup>#</sup>.**

**<sup>#</sup> INFIQC, Dto. Fisico Química - FCQ - UNC**

**<sup>&</sup> INQUIMAE-Dto.Qca. Inorg., Anal.y Fis.Quim. - FCEyN - UBA.**

**rober@qi.fcen.uba.ar mlopez@fisquim.fcq.unc.edu.ar**

El estudio elipsométrico de materiales es una técnica muy versátil para caracterizar superficies y crecimientos. Una de las ventajas que posee es la compatibilidad con técnicas electroquímicas diversas, y el hecho de ser una técnica poco invasiva por cuanto la sonda de medición es simplemente luz.

La impedancia electroacústica es un método derivado de la microgravimetría con microbalanza de cuarzo (QCM). Midiendo la respuesta en frecuencia de un cristal de cuarzo piezoeléctrico cuando es excitado con una señal de alta frecuencia (~ 10 MHz) se pueden obtener datos reológicos de las capas de material en contacto con el.

La elipsometría y la impedancia electroacústica son técnicas basadas en principios diferentes que pueden utilizarse complementariamente para obtener una mejor comprensión de los fenómenos en estudio, así como corroboración independiente de las magnitudes medidas. Para que esto sea posible, es muy importante poder medir simultáneamente con ambas técnicas el mismo material.

En este trabajo, presentamos un sistema de medición simultánea de elipsometría e impedancia electroacústica, que es el primero en su tipo en cuanto a su alta velocidad de medición.

Se estudiaron con este método películas de NiOOH, deposición de Cu y polímeros conductores.

H 25

**DESNATURALIZACIÓN DE PROTEÍNAS EN PRESENCIA DE LIGANDOS: TRATAMIENTO TEÓRICO DE SISTEMAS ACOPLADOS**

**M.S. Celej<sup>a</sup>, S.A. Dassie<sup>b</sup>, G.D. Fidelio<sup>a</sup>**

**<sup>a</sup>Departamento de Química Biológica-CIQUIBIC, <sup>b</sup>Unidad de Matemática y Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000, Córdoba  
e-mail: [mcelej@dqbfq.unc.edu.ar](mailto:mcelej@dqbfq.unc.edu.ar)**

La estabilidad de proteínas es afectada cuando se une a ligandos de alta afinidad. En general, se observa un desplazamiento de la temperatura de desnaturalización hacia mayores valores con el correspondiente incremento de la entalpía de desnaturalización. La interpretación convencional es que el ligando "estabiliza" a la proteína debido a la inducción de un cambio conformacional. Sin embargo, estas modificaciones en la estabilidad tienen una base termodinámica bien conocida: el acople de los equilibrios de desnaturalización y de unión de ligando.

La calorimetría diferencial de barrido (DSC) permite la obtención directa de la energética de transiciones estructurales de biomoléculas inducidas térmicamente. En este trabajo se presenta el desarrollo teórico general para el análisis de termogramas de proteínas obtenidos a distintas concentraciones de ligando. La teoría es aplicada al caso de albúmina sérica humana (HSA) y su interacción con la sonda fluorescente 1,8-ANS a fin de correlacionar resultados obtenidos por diferentes técnicas y validar el modelo de interacción. El formalismo presentado puede adaptarse a rutinas de ajuste con el fin de obtener simultáneamente la energética de desnaturalización de la proteína y de unión de ligando, aumentando la potencialidad del uso de la DSC.

H 26

**DETERMINACIÓN DEL TIPO DE INHIBICIÓN PRODUCIDO POR FLAVONOIDES HIDROXILADOS SOBRE XANTINA OXIDASA**

**G. T. Castro, J. L. Vázquez Rodríguez (\*), S. E. Blanco**

**Área de Química-Física. Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia. Universidad Nacional de San Luis. 5700 San Luis. Argentina. (\*) Departamento de Química Física e Ingeniería Química I. Facultad de Ciencias. Universidade da Coruña. Galicia. España.  
E-mail: [tcastro@unsl.edu.ar](mailto:tcastro@unsl.edu.ar)**

*Xantina oxidasa (XO)* es una metaloflavoproteína ampliamente distribuida en los seres vivos. Por ejemplo, se encuentra en leche, intestino delgado, riñón e hígado. Contiene molibdeno y desempeña un papel esencial en la conversión de las bases púricas a ácido úrico, producto final del catabolismo de las purinas. Por este motivo, actuar farmacológicamente sobre esta enzima constituye un hecho de gran importancia en pacientes que padecen hiperuricemia y gota. Con el objetivo específico de caracterizar el grado y tipo de inhibición que ejercen 5,7(OH)<sub>2</sub>Flavona (1), 5,7,4'(OH)<sub>3</sub>Flavona (2) y 5,7(OH)<sub>2</sub>Flavonol (3) sobre XO, en este trabajo se efectuaron experimentos cinéticos de inhibición en buffer fosfato 0,05 M, pH 7,8 y 30,0°C de temperatura. Las variaciones de las velocidades iniciales en función de las concentraciones iniciales de sustrato (S) y de los inhibidores (I) fueron interpretadas mediante métodos gráficos y computacionales. Los resultados obtenidos permitieron concluir que las flavonas hidroxiladas 1 y 2 producen una inhibición lineal de tipo mixta. Asimismo, comparando los valores obtenidos para las constantes aparentes de inhibición, vinculadas con la disociación del complejo EI (K<sub>i</sub>) y el complejo ESI (K<sub>iu</sub>), se observó que la hidroxilación en la posición C<sub>4</sub> favorece la actividad inhibitoria. Los valores de las constantes K<sub>i</sub> y K<sub>iu</sub> para 2 con relación a los de 1, son entre 6 y 2 veces más bajos, respectivamente. Por otra parte, se estableció que el flavonol 3 ejerce su actividad inhibitoria sobre XO a través de un mecanismo competitivo.

H27

**ESTUDIO ESTRUCTURAL, VIBRACIONAL Y TERMODINÁMICO DE FOSFATOS Y ESTERES FOSFATOS**

F. MANZANO<sup>1</sup>, S. DIAZ<sup>1</sup>, S. BRANDAN<sup>1</sup>, A. BEN ALTABEF<sup>1</sup> y E. A. DISALVO<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química Física. Universidad Nacional de Tucumán. San Lorenzo 456. (4000) San Miguel de Tucumán, email:sondi@unt.edu.ar.

<sup>2</sup>Laboratorio de Fisicoquímica de Membranas Lipídicas. Facultad de Farmacia y Bioquímica. U.B.A. Junín 956 2° P. (C. P.1113) Buenos Aires.

Dentro de un plan de trabajo destinado a caracterizar la hidratación de los fosfatos en fosfolípidos que componen las membranas lipídicas se investigan las propiedades estructurales de fosfatos inorgánicos y ésteres fosfato en presencia de cantidades controladas de agua, tomando como compuestos modelos a fosfatos monoácido, diácido y triácido y fosfatos orgánicos, como sodio fosfoceno piruvato y o-fosfocolamina.

A efectos de obtener información sobre el arreglo espacial, la orientación de las moléculas de agua y sus propiedades fisicoquímicas, se realizaron medidas de espectroscopía infrarroja a transformadas de Fourier, actividades de agua y análisis termogravimétrico. Los estudios se complementaron con cálculos teóricos de propiedades vibracionales de los grupos fosfato involucrados en las moléculas en estudio, con uso del programa Gaussian 98, empleando distintos métodos y bases.

H28

**LÁTEX CARBOXILADOS PARA SOPORTE DE BIOMOLÉCULAS. SÍNTESIS CONTROLADA, CARACTERIZACIÓN Y ADSORCIÓN DE BSA**

V. D. G. Gonzalez<sup>1</sup>, L. M. Gugliotta<sup>1</sup>, C. E. Giacomelli<sup>2</sup> y G. R. Meira<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>INTEC (UNL-CONICET) - (3000) Santa Fe - E-mail: veronikg@ceride.gov.ar

<sup>2</sup>INFIQC - Facultad de Ciencias Químicas (UNC) - (5000) Córdoba.

Este trabajo es una etapa previa a la obtención de partículas sensibilizadas con una proteína antigénica del *Trypanosoma cruzi*, para su uso como reactivo de diagnóstico para la detección de Chagas.

Se sintetizaron partículas de látex de tipo núcleo-coraza mediante copolimerizaciones discontinuas y semicontinuas en emulsión de estireno (St) y ácido metacrílico (AMA) sobre una siembra monodispersa de poliestireno (PS) previamente sintetizada. El AMA en la corteza proporciona los grupos carboxilo que estabilizan el látex y permiten la unión covalente con los grupos amino de las proteínas. Paralelamente, se desarrolló un modelo matemático para predecir las principales variables de reacción y establecer las políticas semicontinuas de agregados de St y AMA.

Luego de la limpieza por desplazamiento de suero, los látex fueron caracterizados, determinándose pH, conductividad, contenido de sólidos, conversión, tamaño de partículas, polidispersión, espesor de la coraza, concentración crítica de coagulación, espesor de la capa de moléculas ancladas sobre la superficie ("hairy layer"), densidad de carga superficial y movilidad electroforética.

Para determinar la capacidad de adsorción de proteínas por parte de los látex y estudiar las fuerzas de interacción involucradas, se realizaron experimentos comparativos de adsorción de albúmina sérica bovina (BSA) sobre las partículas carboxiladas y sobre partículas de PS. Además, para comparar la adsorción física con el acoplamiento covalente de las proteínas, se preparó un sistema en el que la BSA se unió químicamente sobre los grupos carboxilo de las partic

H29

## ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA INTERACCIÓN VAPOR DE AGUA - QUITOSANO

G.A.ALIMENTI<sup>2</sup>, V.J.PEDRONI<sup>2</sup>, M.E.GSCHAIDER<sup>2</sup>, M.L.FERREIRA<sup>1</sup>,  
P.C.SCHULZ<sup>2</sup>, M.E.RAPP<sup>3</sup>

1-PLAPIQUI-UNS-CONICET, Camino La Carrindanga Km 7, CC 717, 8000, B.Blanca

2-UNS, Departamento de Química, Lab. Fisicoquímica, Av. Alem 1253, 8000, B.Blanca

3-CITEFA-PRINSO, Zufriategui 4380, 1603, Villa Martelli

E-mail: pedroni@criba.edu.ar

El quitosano tiene carácter hidrofílico. La humedad relativa (HR) puede afectar considerablemente su estructura y propiedades. Al no haberse encontrado información sistemática relevante al respecto, se llevó a cabo este estudio sobre muestras de quitosano de distinto grado de acetilación y en diferente forma de presentación: polvo y membrana.

El equipo utilizado para este trabajo fue una electrobalanza Cahn-1000, de sensibilidad  $10^{-7}$ g. Se siguió el aumento de peso de muestras expuestas a HR entre 0.3 y 0.9 y temperaturas entre 20°C y 40°C.

Los datos obtenidos se utilizaron para seguir la cinética del proceso y para obtener las isotermas de adsorción correspondientes. Este estudio fue complementado por análisis de Difracción de Rayos X, Espectroscopia FTIR y ATD-TG, a fin de determinar los posibles cambios morfológicos de las muestras en estudio.

La justificación del comportamiento experimental se "soporta" en la modelación teórica del proceso, cuyo trabajo se presenta en este Congreso.

H30

## ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN VAPOR DE AGUA - QUITOSANO

M.L.FERREIRA<sup>1</sup>, G.A.ALIMENTI<sup>2</sup>, M.E.GSCHAIDER<sup>2</sup>, V.PEDRONI<sup>2</sup>, P.C.SCHULZ<sup>2</sup>

1-PLAPIQUI-UNS-CONICET, Camino La Carrindanga Km 7, CC 717, 8000, B.Blanca

2-UNS, Departamento de Química, Lab. Fisicoquímica, Av. Alem 1253, 8000, B.Blanca

E-mail: pedroni@criba.edu.ar

Utilizando métodos de mecánica molecular (MM2) y métodos semiempíricos de cálculo (PM3) dentro del software Chem 3 D 5.0 Ultra (Cambridge Soft) se estudió la adsorción de agua en modelos de quitosano en polvo y quitosano como membrana con distintos grados de desacetilación. Los modelos superficiales considerados fueron varios: cadena de 4 monómeros (aislada), 2 cadenas de 4 monómeros con puente de H corto (longitud 2.4 Å), o puente de H obtenido por minimización (2.8-3.0 Å), intra e intermolecular y 3 cadenas de 4 monómeros con puente de H. Los resultados permiten concluir que el modelo representativo de la adsorción de agua es el de 2 cadenas de 4 monómeros con puente de H de longitudes entre 2.8 y 3 Å. En el modelo de membrana de quitosano, existen moléculas de agua entre las cadenas de 4 monómeros de quitosano. También se consideró la acetilación parcial, reemplazando un grupo  $\text{NH}_2$  por un grupo  $\text{NHCOCH}_3$ . Las moléculas de agua a adsorber se consideraron como monómeros, dímeros y tetrameros en fase vapor. Se obtuvieron energías estéricas y  $\Delta H_{\text{formación}}$  para los sistemas modelo-agua en las distintas conformaciones evaluadas. Mientras que la energía estérica disminuye al comparar el modelo de quitosano polvo-membrana y agua (monómero o dímero) infinitamente alejados con agua adsorbida sobre los distintos sitios de quitosano, los cambios entálpicos indican que la reacción es endotérmica, con entalpías de adsorción entre 12-42 kJ/mol por monómero de agua adsorbido.

En el caso del modelo que incluye un grupo acetilado la adsorción de agua se encuentra termodinámicamente favorecida.

H31

**ESTUDIO CINÉTICO Y TERMODINÁMICO DE LA REMOCIÓN DE METALES PESADOS CON PELLETS DE QUITOSANO – PECTINATO DE CALCIO**

**M. S. RODRIGUEZ<sup>1</sup>, A. L. DEBBAUDT<sup>1</sup>, M. E. GSCHAIDER<sup>1</sup>, M. L. FERREIRA<sup>2</sup>**

**1- LIBAQ, Dpto. de Química, UNS, Av. Alem 1253 (8000) Bahía Blanca**

**2- PLAPIQUI – UNS-CONICET. Camino La Carrindanga, Km 7 CC 717 (8000) B. Bca.**

**E-mail: debbaudt@criba.edu.ar**

Los metales pesados constituyen los contaminantes en el agua de mar y desechos industriales más peligrosos para el medio ambiente. Las bajas concentraciones en que se encuentran en estos medios dificultan su remoción por técnicas sencillas convencionales. El objetivo de este trabajo es el estudio de la utilización de un bioadsorbente en la eliminación de tres metales pesados seleccionados. Los pellets de quitosano-pectinato de calcio obtenidos en nuestro laboratorio constituyen un excelente sistema para la eliminación de los mismos. En este trabajo presentamos el estudio de la cinética de adsorción en un sistema en batch. La cinética de adsorción se puede explicar teniendo en cuenta dos etapas distintas: en primer lugar, una adsorción química superficial y luego, la difusión desde la superficie hasta el interior del pellet. La ecuación cinética que representa el proceso es una expresión parabólica. Los metales estudiados fueron Hg, Pb y Cd. El Pb y el Cd tienen un comportamiento cinético conforme a la ecuación parabólica, no así el Hg. Probablemente la diversidad de especies presentes en las condiciones de adsorción explican el comportamiento del Hg. Se presentaron también las isotermas de adsorción a distintas temperaturas, completando así el estudio termodinámico de los sistemas seleccionados. Dados los muy buenos resultados obtenidos, se concluye que los pellets de quitosano – pectinato de calcio constituyen un excelente adsorbente para la aplicación en la remoción de Pb, Hg y Cd en aguas industriales de desechos.

De esta forma constituye una potencial alternativa para futuras aplicaciones tecnológicas.

H32

**RELACIÓN ENTRE EL GRADO DE ACETILACIÓN Y LA CONFORMACIÓN DEL QUITOSANO EN SOLUCIÓN**

**V. PEDRONI, M.E.GSCHAIDER, P.C.SCHULZ**

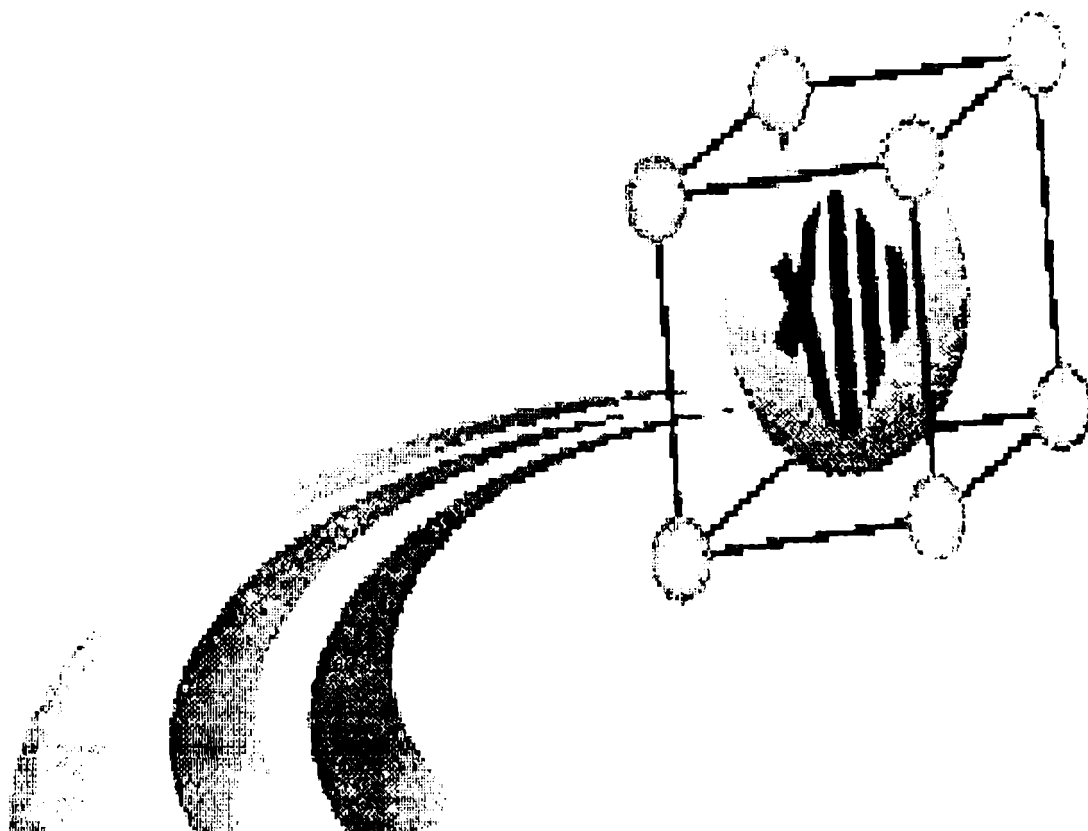
**UNS, Departamento de Química, Lab. de Fisicoquímica, Av. Alem 1253, 8000, B. Blanca**

**E-mail: pedroni@criba.edu.ar**

La quitina está compuesta por unidades de  $\beta$ -D-glucosamina con un grado variable de *N*-acetilación (GA). Mientras que la quitina es un material insoluble en solución acuosa, el quitosano, la forma parcialmente acetilada de la quitina, es soluble en solución diluida de diversos ácidos. Existe una controversia sobre la conformación que adoptan las moléculas de quitosano en solución, y hay datos contradictorios sobre la influencia del grado de acetilación (GA) sobre dicha conformación. En este trabajo se empleó un método de fijación de estructuras lábiles en solución, tales como micelas de tensioactivos catiónicos, para luego observarlas en el microscopio electrónico por transmisión. Este método consiste en el teñido mediante acetato de uranilo, que además fija la estructura existente en solución, y hasta donde sabemos, no ha sido anteriormente aplicado al quitosano para este fin. El ión uranilo tiene una ligera preferencia por complejarse con ligandos con nitrógeno, y el quitosano es un polielectrolito catiónico. Pudo así verificarse directamente que las moléculas de quitosano estudiadas se comportan como cadenas de copolímero en bloque, donde bloques de quitina acetilada prácticamente por completo, en forma de aglomerados globulares ("micelas"), están unidos por fibras de poliglucosamina prácticamente desacetilada, totalmente estiradas por la repulsión electrostática entre los grupos catiónicos cargados. El conjunto debe comportarse hidrodinámicamente como una estructura tipo "gusano", lo que ya ha sido informado en literatura. Se encontró una relación lineal inversa tanto entre longitud de cadena y tamaño de micela y el GA, la cual puede explicarse sobre la base de la estructura de las regiones acetilada y desacetilada.

***SECCIÓN I***

***SÍNTESIS Y PROPIEDADES  
DE COMPUESTOS  
INORGÁNICOS***



**XIII Congreso Argentino  
de Fisicoquímica y Química Inorgánica.  
7 al 10 de Abril – 2003 - Bahía Blanca - Argentina**



## SECCIÓN I

| Sección y<br>Número | TÍTULO   | AUTOR   | Modalidad |
|---------------------|--|---|-----------|
| I1                  | HEMATITA@AOT   | Kleopatra Samara, 1 Sandro A. Faner 1 y Alberto E. Regazzoni 1,2                    | Poster    |
| I2                  | SINTESIS MECANOQUÍMICA DE ESPINELA A TEMPERATURA AMBIENTE  | Daniela Domanski, Guillermina Urretavizcaya, Facundo J. Castro, Fabiana C. Gennari. | Poster    |
| I3                  | HIDRATACIÓN DE HEXACIANO FERRATO (II) DE AMONIO Y ESTRONCIO EN ATMÓSFERAS DE HUMEDAD CONTROLADA                  | L. Medina Córdoba, F. Molinari, M. I. Gómez, J. A. de Morán, P. J. Aymonino.        | Poster    |
| I4                  | ESTUDIO TERMODINÁMICO Y CINÉTICO DE LA ADSORCIÓN DE ACIDO CÍTRICO SOBRE HIDROXIAPATITA. MECANISMO DE REACCIÓN.   | E.D. Vega, G.E. Narda, H. F. Ferretti.  | Poster    |
| I 5                 | SOBRE LA MISTERIOSA REDUCCIÓN DE COMPLEJOS FeIII(CN)5L EN MEDIO BÁSICO   | Julián Jacinto, Valentín Amorebieta y Alejandro Parise                              | Poster    |
| I6                  | EFEECTO DE Cd(II) EN LA SÍNTESIS DE ALUMINATO TRICÁLCICO-C3A-  | Araceli E. LAVAT, Mónica A. TREZZA  | Poster    |
| I7                  | COMPORTAMIENTO ESPECTROSCÓPICO DE NUEVOS ÓXIDOS RELACIONADOS ESTRUCTURALMENTE AL K <sub>2</sub> NiF <sub>4</sub> | Araceli E. LAVAT <sup>1</sup> , Enrique J. BARAN <sup>2</sup>                       | Poster    |
| I8                  | EVALUACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE SO <sub>2</sub>  | J. L. Venaruzzo(1), C. Volzone(2), J. Ortiga(2), A.                                 | Poster    |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
|     | SOBRE MATERIALES TOBÁCEOS Y BENTONÍTICOS NATURALES  | Ortiz Ricardi(1), M. L. Rueda(1)   |        |
| I9  | NUEVA VIA DE SINTESIS DE COMPLEJOS [Ru(RR'NH) <sub>6</sub> ] <sup>3+</sup>  | Carina Gaviglio y Fabio Doctorovich  | Poster |
| I10 | SINTESIS Y ESTUDIO ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCOPICO DE TIOSACARINATOS DE TI (I)  | Susana H. Tarulli <sup>1</sup> , Oscar V. Quinzani <sup>1</sup> , Enrique J. Baran <sup>2</sup> y Oscar E. Piro <sup>3</sup> | Poster |
| I11 | SINTESIS Y CARACTERIZACION DE TIOSACARINATOS DE MERCURIO (II) Y PLOMO (II)  | Diego R. Pérez, Oscar V. Quinzani  | Poster |
| I12 | ESTUDIO ESPECTROSCOPICO-VIBRACIONAL DE PIROGLUTAMATOS METALICOS   | Claudia C. Wagner <sup>1</sup> y Enrique J. Baran <sup>2</sup>   | Poster |
| I13 | COMPLEJOS DE OXOVANADIO (IV) CON $\alpha$ -HIDROXOACIDOS  | Patricia A. M. Williams, Susana B. Etcheverry y Enrique J. Baran   | Poster |
| I14 | ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y ELECTROQUÍMICO DEL DIPICOLINATO CÚPRICO   | Beatriz S. Parajón-Costa <sup>1</sup> , Claudia C. Wagner <sup>2</sup> y Enrique J. Baran <sup>1</sup>                       | Poster |
| I15 | LA ESTRUCTURA DEL GRUPO FENO EN DOS ESTADOS EXCITADOS METAESTABLES (MS1 Y MS2) DEL NA <sub>2</sub> [FE(CN) <sub>5</sub> NO]·2H <sub>2</sub> O | M. E. Chacón Villalba <sup>1</sup> , J. A. Güida, <sup>1,2</sup> E. L. Varetti <sup>1</sup> y P. J. Aymonino <sup>1</sup>    | Poster |
| I16 | INFLUENCIA DE LOS IONES CARBONATO Y NÍQUEL(II) EN LA FORMACIÓN DE APATITAS BIOLÓGICAS Y SINTÉTICAS  | J.R. Guerra-López, <sup>1</sup> C.O. Della Védova, <sup>2,3</sup> J.A. Güida <sup>1,2</sup> y G. Punte <sup>4</sup>          | Poster |
| I17 | ESTUDIO VIBRACIONAL DE CÁLCULOS   | J.R. Guerra-López, <sup>1</sup> C.O. Della Védova, <sup>2,3</sup> J.A. Güida, <sup>1,2</sup> R.                              | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
|     | RENALES POR ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO  | García, I R. Goddard <sup>4</sup> y G. Punte <sup>5</sup>  |        |
| 118 | SINTESIS Y BIOACTIVIDAD DE DOS NUEVOS COMPLEJOS DE VANADILLO (IV) CON ANTIINFLAMATORIOS   | María S. Molinuevo <sup>1</sup> , Susana B. Etcheverry <sup>1,2</sup> y Patricia A.M. Williams <sup>2</sup>  | Poster |
| 119 | COMPLEJOS TERNARIOS DE IMIDAZOL Y ÁCIDO 2-OH-HIPÚRICO CON COBRE Y COBALTO   | Evelina G. Ferrer <sup>1</sup> , Ana C. González Baró <sup>1</sup> , Eduardo E. Castellano <sup>2</sup> y Oscar E. Piro <sup>3</sup> , Patricia A.M. Williams <sup>1</sup> . | Poster |
| 120 | PREPARACIÓN DE MATRICES POROSAS DE SÍLICA EN SOLUCIONES MICELARES .   | Magalí Lovino, M. Fernanda Cardinal, M. Dolores Perez y Delia Bernik.  | Poster |
| 121 | SÍNTESIS DE ESPINELAS DE MAGNESIO (MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ) A PARTIR DE REACCIÓN SÓLIDO-SÓLIDO EN LA PRESENCIA DE LOS CATIONES Li <sup>+</sup> , K <sup>+</sup> Y Cl <sup>-</sup> | Fabiola J. Alvarez <sup>1</sup> , Ana E. Bohé <sup>2</sup> , Daniel M. Pasquevich <sup>1,2</sup>   | Poster |
| 122 | ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN DE DIOXO COMPLEJOS DE Re(V) CON SERO-ALBÚMINA BOVINA  | Fernanda Cerdá <sup>1</sup> , Eduardo Méndez <sup>1</sup> , Jorge S. Gancheff <sup>2</sup> , Carlos Kremer <sup>2</sup> , Ana M. Castro Luna <sup>3</sup>                    | Oral   |
| 123 | CARACTERIZACION Y REACTIVIDAD QUÍMICA DE LA NUEVA FAMILIA DE COMPLEJOS [(RNCHCHNR)Co(CO)(NO)]   | Florencia Di Salvo <sup>1</sup> , Fabio Doctorovich <sup>1</sup> y Monika Sieger <sup>2</sup>  | Poster |
| 124 | REACCION INESPERADA DE CICLOPROPILAMINA CON Fe(CN) <sub>5</sub> NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>  | Javier A. Bocchio, Fabio Doctorovich   | Poster |
| 125 | PREPARACIÓN Y PROPIEDADES DE LA N-ACETILSULFANILAMIDA DE CU(II)   | Pereyra, Valeria Michel, Alejandra, Cruz, Karina Castillo, Dina Morán Juana A. de  | Poster |
| 126 | ESTUDIO DE LA SOLUBILIDAD DE Al EN  | R.E. Baby <sup>1,2</sup> , M.D. Cabezas <sup>1</sup> , D.G. Lamas <sup>1</sup> , E.D. Cabanillas <sup>3</sup> y  | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
|     | SnO <sub>2</sub> EN POLVOS SINTETIZADOS POR GELIFICACIÓN-COMBUSTION   | N.E. Walsøe de Recal   |        |
| I27 | FORMA t <sup>o</sup> DE LA FASE TETRAGONAL EN SOLUCIONES SÓLIDAS HOMOGÉNEAS EN COMPOSICIÓN DE ZrO <sub>2</sub> -CeO <sub>2</sub>  | G.E. Lascalea <sup>1</sup> , D.G. Lamas <sup>1</sup> , M.E. Rapp <sup>1</sup> , E. Djurado <sup>2</sup> y N.E. Walsøe de Recal           | Poster |
| I28 | SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS TRINUCLEARES DE FÓRMULA TRANS-[FE <sup>III</sup> -M-CN-M <sup>III</sup> (CYCLAM)-NC-M-FE <sup>III</sup> (CN) <sub>5</sub> ]-3, M= CO, CR, RU Y CYCLAM= 1,4,8,11-TETRAAZACICLOTETRADECANO | J. Petrone <sup>1</sup> , P. Alborés, <sup>1</sup> L. D. Slep, <sup>2</sup> T. Weyhermüller <sup>2</sup> y Luis M. Baraldo. <sup>1</sup> | Oral   |
| I29 | SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LA FAMILIA DE COMPUESTOS TRANS-RU(L) <sub>4</sub> X <sub>2</sub> , L=4-tBuPy, 4-MeOPy Y 4-DMAPy X=Cl-, CN-, SCN-  | G. Pierslinger, <sup>1</sup> P. Alborés, <sup>1</sup> L. D. Chaia <sup>1</sup> , O. E. Piro <sup>2</sup> y, L. M. Baraldo. <sup>1</sup>  | Poster |
| I30 | SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CLÚSTERES CONTENIENDO IONES Cr(III) UNIDOS POR PUENTES CIANURO  | Melina B. Rossi, , Pablo Alborés y Luis M. Baraldo.  | Poster |
| I31 | SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA NUEVA SERIE DE COMPLEJOS DE OSMIO TRANS SUSTITUIDOS   | Martín Gaitán, <sup>1</sup> L. D. Slep, <sup>2</sup> T. Weyhermüller <sup>2</sup> y Luis M. Baraldo. <sup>1</sup>                        | Poster |
| I32 | SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NITROSIL-COMPLEJOS CONTENIENDO 2, 2' AZOBIS(PIRIDINA)   | Martín Gaitán, <sup>1</sup> Wolfgang Kaim <sup>2</sup> y Luis M. Baraldo. <sup>1</sup>   | Poster |

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| 133 | SÍNTESIS DE ARCILLAS PILAREADAS:<br>INFLUENCIA DE LA CANTIDAD DE Al <sup>3+</sup> INCORPORADO   | Mara Dávila, Cecilia Solar y Karim Sapag   | Poster |
| 134 | SÍNTESIS Y PROPIEDADES DE COMPLEJOS SULFATIAZOL-COBALTO   | S. Bellú <sup>1</sup> , E. Hure <sup>1</sup> , G. Molina <sup>1</sup> , M. Trapé <sup>1</sup> , C. Trossero <sup>1</sup> , P. Williams <sup>2</sup> , G. Picó <sup>3</sup> , A. Levina <sup>4</sup> , M. Rizzotto <sup>1</sup> | Poster |
| 135 | URACILATOS Y 5-HALOURACILATOS DE NI(II), CU(II) Y ZN(II): SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESPECTROSCÓPICA Y ESTRUCTURAL  | Simón Amengual <sup>1</sup> , María C. Apella <sup>2,3</sup> , Francisco Caldentey <sup>1</sup> , Ángel García-Raso <sup>1</sup> , Juan J. Fioll <sup>1</sup> , Ángel Terrón <sup>1</sup> y Roxana M. Tótar <sup>2,3</sup>     | Oral   |
| 136 | COMPLEJOS DE LAPACHOLATO Y Cobalto(II) CON DIMETILFORMAMIDA Y AGUA: [Co(Lap) <sub>2</sub> (DMF) <sub>2</sub> ] y [Co(Lap) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ].2(DMF) | Miguel A. Martínez*, María C.L. de Jiménez, Eduardo E. Castellanob, Oscar E. Piroc y Pedro J. Aymoninod,   | Poster |
| 137 | ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y ACTIVIDAD SUPERÓXIDO DISMUTASA DEL HIPURATO DE Cu(II)   | Mónica I. Rodríguez <sup>1</sup> , Silvia G. Manca <sup>1</sup> , Roxana M. Tótar <sup>2,3</sup> y Enrique J. Baran <sup>4</sup>   | Poster |
| 138 | SINTESIS Y CARACTERIZACION DE COMPLEJOS L <sub>5</sub> M-N <sup>o</sup> N-Ar-N <sup>o</sup> N-ML <sub>5</sub> (M= Ru, Ir)   | Natalia Escola y Fabio Doctorovich   | Poster |
| 139 | NUEVOS COMPLEJOS MONO- Y DI-NUCLEARES DE RENIO Y RUTENIO CON LIGANDOS AROMÁTICOS  | María G. Mellace*, Florencia Fagalde*, Néstor E. Katz*, Irma G. Crivelli &, Alvaro Delgadillo#, Ana María Leiva# y Bárbara Loeb #  | Poster |
| 140 | INTERACCIONES DE INTERCAMBIO EN LOS COMPLEJOS DE COBRE(II) CON LOS DIPÉPTIDOS L-LEUCIL-   | Nieves M. C. Casado <sup>1</sup> y Rafael Calvo <sup>1, 2</sup>  | Poster |

|     |   |   |        |
|-----|---|---|--------|
|     | L-TIROSINA Y L-TIROSIL-L-LEUCINA TRANSMITIDAS A TRAVÉS DE PUENTES DE H  |   |        |
| I41 | SÍNTESIS A BAJA TEMPERATURA DE CARBUROS COMPLEJOS DE MOLIBDENO  | Silvia Alejandra ALCONCHEL  | Poster |
| I42 | INCORPORACIÓN DE ORO EN MATRICES DE TiO <sub>2</sub> MESOESTRUCTURADO   | M. Dolores Pérez <sup>1</sup> , Mauricio Calvo <sup>1</sup> , Sara A. Bilmes <sup>1</sup> , Galo Soler Illia <sup>2</sup> , Clément Sanchez <sup>2</sup>  | Oral   |
| I43 | SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y MODIFICACIÓN SUPERFICIAL DE FILMS MESOPOROSOS DE TiO <sub>2</sub> .   | Paula C. Angelomé <sup>1,2</sup> , Mauricio Calvo <sup>1</sup> , M. Claudia Marchi <sup>1</sup> , Sara A. Bilmes <sup>1</sup> , Galo Soler Illia <sup>2,3</sup> Miguel A. Blesa <sup>2</sup> David Grosso <sup>3</sup> Eduardo Crepaldi <sup>3</sup> y Clément Sanchez <sup>3</sup> | Oral   |
| I44 | SÍNTESIS DE MATERIALES NANOESTRUCTURADOS Y ÓXIDOS MESOPOROSOS POR AUTOENSAMBLADO INDUCIDO POR EVAPORACIÓN (AEIE).   | Galo Soler Illia <sup>1,2</sup> Eduardo L. Crepaldi <sup>2</sup> David Grosso <sup>2</sup> y Clément Sanchez <sup>2</sup>   | Oral   |
| I45 | REACCIONES DE PORFIRINAS FERRICAS CON DONORES DE NITROXILO  | Sara E. Bari, Marcelo Martí y Fabio Doctorovich   | Poster |
| I46 | PREPARACIÓN DE DOBLES PEROVSKITAS POR VIA HÚMEDA  | Silvia E. JACOBO  | Poster |
| I47 | SINTESIS, ESTUDIO ESTRUCTURAL ESPECTROSCOPICO Y TERMICO DE [Nd(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> .6 H <sub>2</sub> O | E.V. Brusau <sup>1</sup> , J.C. Pedregosa <sup>1</sup> , G.E. Narda <sup>1</sup> , G. Echeverria <sup>2,3</sup> , G. Punte <sup>2</sup>   | Poster |
| I48 | SINTESIS, ESTRUCTURA Y ESPECTROS FTIR DE COMPLEJOS METALICOS DE Zn(II), Cu(II) Y Co(II) CON 2-  | G. E. Camí, J. C. Pedregosa, M. Liu González (1), F. Sanz Ruiz (1)  | Oral   |

|     |   |   |        |
|-----|---|---|--------|
|     | AMINO-5-BENCILMERCAPTO-1,3,4-TIADIAZOL  |   |        |
| 149 | SINTESIS, COMPORTAMIENTO VIBRACIONAL Y TERMICO DE Nd <sub>2</sub> (C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> .4H <sub>2</sub> O y Eu <sub>2</sub> (C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> .5H <sub>2</sub> O | D. A. Curvale, M.C. Bernini, E. V. Brusau, G.E. Narda   | Poster |
| 150 | COMPORTAMIENTO ESTRUCTURAL Y MAGNETICO DE LA PEROVSKITA DOBLE Sr(Fe <sub>2/3</sub> Mo <sub>1/3</sub> )O <sub>3</sub> EN FUNCION DE LA TEMPERATURA.  | M.del C. Viola(1), J.C. Pedregosa(1), R.E. Carbonio(2), M.J. Martínez López(3) J.A. Alonso(3) | Oral   |
| 151 | PEROVSKITAS DOBLES Ca(B' <sub>2/3</sub> B'' <sub>1/3</sub> )O <sub>3</sub> CON B' = Co, Fe y B'' = Mo, W, Te, U. SINTESIS Y REFINAMIENTO DE LAS ESTRUCTURAS POR ANALISIS RIETVELD   | M.del C. Viola, M.S. Augsburger, R.M. Pinacca, J.C. Pedregosa, R.E. Carbonio(1)               | Poster |

11

### HEMATITA@AOT

Kleopatra Samara,<sup>1</sup> Sandro A. Faner<sup>1</sup> y Alberto E. Regazzoni<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Unidad de Actividad Química, CAC, Comisión Nac. de Energía Atómica  
Av. General Paz 1499, 1650-San Martín. e-mail: [regazzon@cnea.gov.ar](mailto:regazzon@cnea.gov.ar)

<sup>2</sup>Instituto de Tecnología "Jorge A. Sabato", Universidad Nacional de San Martín.

El uso de sistemas micelares inversos para la síntesis de calcogenuros metálicos nanoparticulados está muy difundido: este procedimiento permite además preparar materiales autosoportados en los que las partículas inorgánicas están embebidas en una matriz polimérica orgánica. Los ejemplos de óxidos metálicos preparados por esta vía son, sin embargo, escasos. Este trabajo describe la precipitación de hematita en micelas inversas.

Las nanopartículas de hematita fueron preparadas mezclando microemulsiones H<sub>2</sub>O/AOT/n-heptano que, en su interior acuoso, contenían FeCl<sub>3</sub> y KOH, respectivamente; la relación molar  $w = \text{H}_2\text{O}/\text{AOT}$  se modificó entre 5 y 10, mientras que la relación AOT/n-heptano fue siempre 0.03 (0.2 M). La precipitación fue monitoreada siguiendo la evolución de las bandas a 405 y 465 nm, asignadas a las transiciones  $3e_g \rightarrow 3e_g^*$  y  $2t_{2g} \rightarrow 2t_{2g}^*$  del hierro en la hematita, y ausentes en la microemulsión de partida. Los espectros muestran un rápido desarrollo de las bandas; éste tiene lugar en el orden de los segundos. Después de ca. 6 min. la absorbencia aumenta con  $t^{1/2}$ , indicando que el crecimiento de las partículas está controlado por la difusión de las micelas. En concordancia, la energía de activación aparente es 6.33 kJ mol<sup>-1</sup>, y es independiente de  $w$ . La pendiente de las curvas Abs. vs  $t^{1/2}$  es directamente proporcional a  $w$ . Estos resultados demuestran que la nucleación y el crecimiento de las partículas están controlados por la frecuencia de encuentros de las micelas. Cuando el solvente se evapora, se obtienen suspensiones sólidas de hematita dispersa en *vidrios* de AOT.

12

### SÍNTESIS MECANOQUÍMICA DE ESPINELA A TEMPERATURA AMBIENTE

Daniela Domanski<sup>a</sup>, Guillermina Urretavizcaya<sup>b,d</sup>, Facundo J. Castro<sup>c,d</sup>  
y Fabiana C. Gennari<sup>b</sup>

Centro Atómico Bariloche

<sup>a</sup>Universidad Tecnológica Nacional, Córdoba

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

<sup>c</sup>Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), <sup>d</sup>Instituto Balseiro (UNC and CNEA)

Av. Bustillo km 9.5, R8402AGP - S. C. de Bariloche, Argentina

[urreta@cab.cnea.gov.ar](mailto:urreta@cab.cnea.gov.ar)

La espinela de magnesio y aluminio (MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) es un material refractario muy utilizado debido a su alto punto de fusión, baja expansión térmica, considerable dureza y alta resistencia al ataque químico. El método convencional para preparar la espinela es a través de reacción en estado sólido a alta temperatura. En el presente trabajo se presenta la síntesis de MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> por medio de una ruta mecanoquímica alternativa. El método involucra una única etapa, en la cual mezclas de  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO}$ ,  $\text{AlO}(\text{OH})\text{-MgO}$ , o  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO}$  son molidas a temperatura ambiente en atmósfera de aire. La formación de MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> a partir de la alúmina de transición ( $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ ) ocurre más rápidamente que a partir de boehmita [AlO(OH)] o  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Luego de 140 horas de tratamiento en molino de bolas, la mezcla  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO}$  da un rendimiento de 98% de MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Este proceso mecanoquímico podría ser usado para producir aluminatos con estructura de espinela de otros metales (Cu, Ni, Zn) a partir de una mezcla del óxido metálico y una alúmina de transición.

13

**HIDRATACIÓN DEL HEXACIANO Ferrato(II) DE AMONIO Y ESTRONCIO EN ATMÓSFERAS DE HUMEDAD CONTROLADA**

**L. Medina Córdoba<sup>\*</sup>, F. Molinari<sup>\*</sup>, M. I. Gómez<sup>\*</sup>, J.A. de Morán<sup>\*y</sup> y P.J. Aymonino<sup>\*\*</sup>**

**<sup>\*</sup>Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia- UNT. Ayacucho 491, 4000 San Miguel de Tucumán. E-mail: [lucor@unt.edu.ar](mailto:lucor@unt.edu.ar)**

**<sup>\*\*</sup>CEQUINOR, UNLP, C.C.962, 1900 La Plata.**

Datos de TGA y DTAs se encontraron para el  $\text{Sr}(\text{NH}_4)_2[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  en atmósferas de nitrógeno y de oxígeno demuestran que el  $\text{Sr}(\text{NH}_4)_2[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  presenta diferentes hidratos. Para estudiar la estabilidad de los mismos, se sintetizó el compuesto mediante una técnica desarrollada al efecto, y se lo dejó cristalizar en atmósferas de humedad controlada, desde 10% a 97%.

Los hidratos obtenidos en cada caso se analizaron mediante determinaciones termogravimétricas y espectroscopia de infrarrojo. Los resultados evidencian que el hexacianoferrato(II) de amonio y estroncio anhidro es estable en atmósferas de humedad inferior al 40%. Desde el 40% hasta el 90% el grado de hidratación varía de 2 a 13 moléculas de agua por mol del compuesto. Para humedades superiores al 90% se produce deliquesencia. La cantidad de agua absorbida alcanza hasta 200% respecto al peso original del compuesto anhidro.

Los resultados sugieren que el hexacianoferrato(II) de amonio y estroncio podría ser utilizado como un eficiente desecante, que por sus propiedades, sería fácil de manipular y de regenerar.

14

**ESTUDIO TERMODINAMICO Y CINETICO DE LA ADSORCION DE ACIDO CITRICO SOBRE HIDROXIAPATITA. MECANISMO DE REACCION**

**E.D. Vega<sup>(1)</sup>, G.E. Narda<sup>(1)</sup>, H.F. Ferretti<sup>(2)</sup>**

**<sup>(1)</sup> Química Inorgánica, <sup>(2)</sup> Química-Física, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera 5700- San Luis.**

**E-Mail: [evega@unsl.edu.ar](mailto:evega@unsl.edu.ar)**

En el marco de estudios efectuados sobre la hidroxapatita (HAP) y mezcla de HAP- $\text{CaCO}_3$ , utilizada como modelo del esmalte dental, tendientes a investigar las alteraciones producidas en su estructura por la acción del ácido cítrico se aborda el estudio de estos sistemas sólido-líquido. Se realizaron experiencias preliminares poniendo en contacto HAP con soluciones de ácido cítrico en concentraciones  $10^{-1}$ - $10^{-4}$  M a 5, 15 y 25°C, para determinar los tiempos de equilibrio y los valores de concentración más apropiados para estudiar el fenómeno de adsorción superficial. Este sistema mostró un comportamiento dependiente de la concentración de ácido cítrico, produciendo disolución de HAP con posterior precipitación superficial a concentraciones superiores a  $10^{-3}$  M y a valores inferiores, la interacción transcurre a través de fenómenos de adsorción en coincidencia con datos de bibliografía. La adsorción de ácido cítrico sobre HAP se ajusta a un comportamiento tipo Freundlich. A partir del análisis termodinámico es posible informar los valores de las constantes de adsorción y de energía involucrada. El estudio cinético permitió concluir que la reacción responde a un proceso de primer orden. Mediante cálculos teórico *ab initio* fue posible estimar el mecanismo de reacción superficial, encontrando la estructura más probable del complejo de activación.

15

**SOBRE LA MISTERIOSA REDUCCIÓN DE COMPLEJOS  
Fe<sup>III</sup>(CN)<sub>5</sub>L EN MEDIO BÁSICO**

**Julián Jacinto, Valentín Amorebieta y Alejandro Parise**

**INQUIMAE, DQIAQF, FCEN, UBA**

**Ciudad Universitaria, Pabellón II, C1428EHA Buenos Aires, Argentina**

Se presentan resultados preliminares sobre la reacción de reducción de (CN)<sub>5</sub>Fe<sup>III</sup>-piracina<sup>2-</sup>, (CN)<sub>5</sub>Fe-piracina-Fe(CN)<sub>5</sub><sup>4-</sup> y (CN)<sub>5</sub>Fe<sup>III</sup>-n-metilpiracinio<sup>1-</sup> en medio básico. La hipótesis de trabajo consiste en que la reducción del complejo viene acompañada de la oxidación de agua por esfera externa a HO<sub>2</sub><sup>-</sup>.

Se ha encontrado que en las voltametrías cíclicas de los compuestos inicialmente reducidos aparece una onda catalítica que crece a medida que se alcaliniza el medio y que decrece (hasta un voltagrama cuasi reversible) si las velocidades de barrido aumentan. La alcalinización de soluciones estables de complejos de Fe<sup>III</sup> conllevan a una recuperación del 100% de los equivalentes de complejo de Fe<sup>II</sup>, en comparación con una reducción completa con ácido ascórbico. Se detecta la presencia de burbujas por acidificación de la solución en ciertas condiciones de reacción. Se investiga la composición y estequiometría de los gases desarrollados por espectroscopía de masa. Se asocia la aparición de CO después de la reacción con la presencia de pequeñas cantidades de metanol en los sólidos sintetizados, y se analiza el efecto del metanol en la electroquímica. Al momento de presentación del resumen, se investigaba especialmente la presunta formación de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, HO<sub>2</sub><sup>-</sup> y O<sub>2</sub>, así como las condiciones de generación de esos productos de oxidación de agua. Se estudia el mecanismo de reducción de los complejos.

16

**EFFECTO DE Cd(II) EN LA SÍNTESIS DE ALUMINATO  
TRICÁLCICO-C<sub>3</sub>A-**

**Araceli E. LAVAT, Mónica A. TREZZA**

**Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Av. Del Valle 5737, 7400-Olavarría.**

**E-mail: alavat@fio.unicen.edu.ar**

Actualmente hay considerable interés en el uso de materiales residuales, como cenizas volantes y escorias de bajo costo en la producción de cemento portland (CP), los que entre otros elementos tóxicos para el ser humano, pueden contener Cd(II) en baja concentración. Se sabe que el cadmio es principalmente estabilizado en las fases mayoritarias del *clinker*, compuestas por silicatos di y tricálcicos. Sin embargo hay poca información sobre el efecto estructural del catión Cd(II) en la síntesis de C<sub>3</sub>A durante la formación del *clinker*.

Teniendo en cuenta que el cadmio puede ser potencialmente incorporado al C<sub>3</sub>A del CP como catión impureza, y dada la similitud de tamaño entre Cd(II) y Ca(II), es de interés determinar en que medida la red de *aluminato* es capaz de sustituir un catión por otro, generando un *aluminato* mixto como fase única, caracterizable estructuralmente. Por ello se ha investigado una serie de fases de composición nominal Ca<sub>3-x</sub>Cd<sub>x</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, (siendo 0 ≤ x ≤ 1.75), mediante DRX y también por espectroscopía vibracional FTIR. La síntesis se llevó a cabo por reacción en fase sólida a partir de óxidos y carbonatos puros. El diagrama de rayos X ha podido ser indexado como fase única hasta x=1.0, ya que las siguientes composiciones muestran la presencia de otro *aluminato* Ca<sub>12</sub>Al<sub>14</sub>O<sub>33</sub> - *Mayenita*-, como fase mayoritaria. Los parámetros de celda calculados para los compuestos son casi idénticos. Los espectros infrarrojos medidos confirman los resultados obtenidos por DRX ya que las bandas asociadas a los poliedros AlO<sub>6</sub>, que dominan el espectro, se modifican sustancialmente a la composición x=1.0.

17

## COMPORTAMIENTO ESPECTROSCÓPICO DE NUEVOS ÓXIDOS RELACIONADOS ESTRUCTURALMENTE AL $K_2NiF_4$

Araceli E. LAVAT<sup>1</sup>, Enrique J. BARAN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Av. Del Valle 5737, 7400-Olavarría.

<sup>2</sup>CEQUINOR, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1900-La Plata.

E-mail: [alavat@fio.unicen.edu.ar](mailto:alavat@fio.unicen.edu.ar)

Los óxidos mixtos de fórmula general  $NaLnTiO_4$  ( $Ln =$  lantánidos) y los materiales obtenidos a partir de estos, por intercambio iónico de  $Na^+$  por  $Ag^+$ ,  $AgLnTiO_4$ , están relacionados estructuralmente al  $K_2NiF_4$ . Estos compuestos interesan por sus propiedades luminiscentes y más recientemente porque se ha reportado conductividad iónica en ellos y su aplicación en fotocatalisis.

La red original de  $NaLnTiO_4$  es una superestructura en la que los iones  $Na(I)$  y  $Ln(III)$  ocupan los sitios de tipo A, formando capas  $Na,Na - Ln,Ln$ . Un aspecto interesante de este grupo de materiales es que el catión  $Na^+$  es fácilmente reemplazado por  $Ag^+$  mediante reacción de intercambio iónico, debido a estas características del retículo cristalino.

Los materiales fueron sintetizados por reacción en fase sólida a alta temperatura y luego caracterizados por DRX, determinándose los parámetros de celda y el indexado del diagrama de polvos correspondiente. Se confirmó el ordenamiento estructural y la dependencia de los parámetros con el tamaño de los iones  $Ln$  presentes.

Para estudiar el comportamiento espectroscópico se midieron y asignaron los espectros vibracionales FTIR de todos los compuestos preparados. La asignación de los modos internos de cada uno de los poliedros  $MO_n$  se discute en relación con la información estructural disponible.

18

## EVALUACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE $SO_2$ SOBRE MATERIALES TOBÁCEOS Y BENTONÍTICOS NATURALES

J. L. Venaruzzo<sup>(1)</sup>, C. Volzone<sup>(2)</sup>, J. Ortega<sup>(2)</sup>, A. Ortiz Ricardi<sup>(1)</sup>, M. L. Rueda<sup>(1)</sup>

1. Asentamiento Universitario Zapala – Facultad de Ingeniería Univ. Nacional del Comahue (UNC) 12 de Julio y Rahue, (8340) Zapala, Prov. Neuquén. Tel. 02942-421847 E-mail: [unc@zapala.com.ar](mailto:unc@zapala.com.ar)

2. Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica- CETMIC-CONICET- C.C.49, Cno. Centenario y 506, (1897) M.B.Gonnet, Prov. Buenos Aires.

E-mail: [volzcris@netverk.com.ar](mailto:volzcris@netverk.com.ar)

La finalidad de reducir los niveles de gases contaminantes en la atmósfera induce en la actualidad a la búsqueda y diseño de materiales adsorbentes que permitan su retención y/o separación antes de ser liberados. Con este objetivo, diferentes materiales tobáceos y bentoníticos de la provincia de Neuquén, Argentina, fueron utilizados para evaluar su comportamiento como adsorbentes de gas  $SO_2$ . Las muestras fueron caracterizadas mineralógica y estructuralmente por técnicas de difracción de rayos X, análisis químicos y análisis térmicos. La adsorción de gas  $SO_2$  sobre los materiales naturales se realizaron en un equipo volumétrico a 25 °C y 1 kg/cm<sup>2</sup>, previa desgasificación. La diferente composición mineralógica y las características estructurales serían responsables del diferente grado de adsorción.

PALABRAS CLAVES: adsorbentes, bentonitas, materiales tobáceos, gases,  $SO_2$ .

I 9

**NUEVA VIA DE SINTESIS DE COMPLEJOS  $[\text{Ru}(\text{RR}'\text{NH})_6]^{3+}$**

**Carina Gaviglio y Fabio Doctorovich**  
**DQIAYQF/INQUIMAE, FCEN, UBA,**  
**C.U., Pab. II, Piso 3, C1428EHA, Buenos Aires**  
**cgaviglio@qi.fcen.uba.ar**

En el presente trabajo se estudiaron nuevas alternativas para la síntesis de complejos del tipo  $[\text{Ru}(\text{RR}'\text{NH})_6]^{3+}$ , donde  $\text{R}, \text{R}' = \text{H}$  o alquilo. Para ello se partió de pentacloroacuoortenio(III),  $[\text{Ru}(\text{Cl})_5\text{H}_2\text{O}]^{2-}$ , en solución acuosa, al que se le agregó el compuesto  $\text{RR}'\text{NH}$  correspondiente ( $\text{RR}'\text{NH} =$  etilendiamina (EN); *n*-butilamina (BA); 2,2,6,6-tetrametilpiperidina (TMP) y  $\text{NH}_3$ ).

Las reacciones se siguieron por espectroscopía UV-visible obteniéndose bandas características de los complejos hexaaminorutenio (II) ( $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ ) y trietilendiaminorutenio (II) ( $[\text{Ru}(\text{EN})_3]^{2+}$ ), además de las bandas a 253 y 398 nm atribuibles a hexabutilaminorutenio (II) ( $[\text{Ru}(\text{BA})_6]^{2+}$ ). Un mecanismo general implica la reducción por amina del  $\text{Ru}^{3+}$  presente en  $[\text{Ru}(\text{Cl})_5\text{H}_2\text{O}]^{2-}$  a  $\text{Ru}^{2+}$ , y la eliminación de los  $\text{Cl}^-$  que son reemplazados por amina. Posteriormente se procedió a la oxidación de los aminocomplejos con  $\text{I}_2$  obteniéndose bandas correspondientes a  $[\text{Ru}(\text{EN})_3]^{3+}$ ,  $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  y  $[\text{Ru}(\text{BA})_6]^{3+}$ .

En el caso de la EN se ha observado que el complejo ( $[\text{Ru}(\text{EN})_3]^{3+}$ ) se descompone fácilmente vía oxidación de la amina a imina. Sin embargo, la TMP no se puede oxidar por esta vía debido a que no posee hidrógenos en el C $\alpha$  al N aminico. Debido a esto interesa estudiar la reacción de TMP frente a ( $[\text{Ru}(\text{Cl})_5\text{H}_2\text{O}]^{2-}$ ). Como esta amina (TMP) presenta impedimento estérico se adiciona junto con  $\text{NH}_3$  en proporción 20:2 respectivamente para completar la esfera de coordinación del metal. La espectroscopía UV-visible indica bandas en 260, 311 y 400 nm; y luego del agregado de  $\text{I}_2$  las mismas se desplazan a 323 y 410 nm. La primera de estas bandas es asignable al producto  $[\text{Ru}(\text{TMP})_x(\text{NH}_3)_y]^{3+}$ . Según experimentos a distintas relaciones TMP: $\text{NH}_3$  se asume  $x=4$  e  $y=2$ .

I 10

**SINTESIS Y ESTUDIO ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCOPICO DE TIOSACARINATOS DE Tl (I)**

**Susana H. Tarulli<sup>1</sup>, Oscar V. Quinzani<sup>1</sup>, Enrique J. Baran<sup>2</sup> y Oscar E. Piro<sup>3</sup>**

- 1. Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Avda. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca. E-mail: [starulli@criba.edu.ar](mailto:starulli@criba.edu.ar).**
- 2. Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata.**
- 3. Departamento de Física e Instituto IFLP (CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata.**

El ion talio (I) tiene poca tendencia a formar complejos, conociéndose pocos ejemplos de compuestos de coordinación con haluros y ligandos que poseen oxígeno y azufre en sus moléculas. La química del ion Tl (I) posee aspectos semejantes a la del ion potasio, por lo cual compete con él en los sistemas biológicos, bloqueando vías enzimáticas y convirtiéndose así en un agente sumamente tóxico.

En el marco de nuestros estudios con ligandos de interés biológico y metales de postransición, en el presente estudio se dan a conocer las preparaciones, los estudios estructurales por difracción de rayos-X y los análisis espectroscópicos vibracionales y electrónicos de dos compuestos de Tl (I) con tiosacarina: 1. Tiosacarinato de talio(I) monohidratado  $[\text{Tl}(\text{tsac})]\cdot\text{H}_2\text{O}$  y 2. Tiosacarinatofenantrolinatolio(I),  $[\text{Tl}(\text{tsac})(\text{fen})]$ .

I 11

## SINTESIS Y CARACTERIZACION DE TIOSACARINATOS DE MERCURIO (II) Y PLOMO (II)

Diego R. Pérez, Oscar V. Quinzani

Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Avda. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca. E-mail: quinzani@criba.edu.ar.

El interés por la química del mercurio, plomo y compuestos tioles, tioamida y sustancias afines se origina, principalmente, en la afinidad que presentan los iones mercurio (II) y plomo (II) por ligandos azufrados, los que coordinan generalmente a través del átomo de azufre. Esta capacidad ha sido aplicada en la detoxificación de organismos envenenados con estos metales.

En este estudio se analiza la interacción entre los iones mercuríco y plumboso y la tiosacarina, una tioamida cíclica que deriva de la sacarina y que en su forma tautómerica tiolato manifiesta la capacidad de coordinarse con fuerza a ellos. Cuando se hacen reaccionar sales de los metales con la tiosacarina, precipitan los tiosacarinos de los iones correspondientes.  $Hg(tsac)_2$  (A) y  $Pb(tsac)_2 \cdot H_2O$  (B). En presencia de bases que contienen nitrógeno o fósforo, se produce la formación de diversos compuestos ternarios, en los que el ion tiosacarinato actúa como ligando monodentado ( $\eta^1-S$ ), al igual que en los compuestos (A) y (B) o como quelato ( $\eta^2-S,N$ ).

Además y para estudiar la interacción existente entre el mercurio y el cloro, que puede coordinarse en forma de puente o como átomo terminal, se sintetizaron distintos compuestos cuaternarios en los que un anión cloruro sustituyó a un tiosacarinato.

Los productos sólidos obtenidos han sido caracterizados por espectroscopia infrarroja y UV-visible, conductividad y análisis químico elemental.

I 12

## ESTUDIO ESPECTROSCOPICO-VIBRACIONAL DE PIROGLUTAMATOS METALICOS

Claudia C. Wagner<sup>1</sup> y Enrique J. Baran<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, 7400-Olavarría. E-mail: cwagner@vaf.com.ar

<sup>2</sup>Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR/CONICET, UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C.Correo 962, 1900-La Plata

El ácido L-piroglutámico actúa como componente N-terminal en proteínas, es un intermediario en muchos procesos de biosíntesis y aparece involucrado en el transporte de amino ácidos a través de las membranas celulares. Los piroglutamatos metálicos, usualmente denominados *pidolatos*, constituyen interesantes fármacos para la suplementación de metales y son componentes de variados productos cosméticos.

En esta comunicación se presenta la síntesis, caracterización y análisis espectroscópico-vibracional de cuatro complejos metálicos del ácido L-piroglutámico: los *pidolatos* de zinc, litio, calcio y magnesio. Las estructuras de los tres primeros son conocidas y fueron confirmadas a partir del análisis de sus respectivos diagramas de polvos de rayos X. A partir del estudio de los espectros de IR de estos complejos, en comparación con los del ácido libre, fue también posible plantear una estructura razonable para el compuesto de magnesio.

I 13

**COMPLEJOS DE OXOVANADIO (IV) CON  
 $\alpha$ -HIDROXOACIDOS**

**Patricia A. M. Williams, Susana B. Etcheverry y Enrique J. Baran**

**Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR/CONICET, UNLP),  
Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C.Correo 962, 1900-La Plata  
E-mail: [williams@quimica.unlp.edu.ar](mailto:williams@quimica.unlp.edu.ar)**

Se sintetizaron cuatro complejos del catión  $\text{VO}^{2+}$  con los ácidos D-glucónico y D-sacárico, de estequiometrías  $\text{Na}_2[\text{VO}(\text{gluc})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_4[\text{VO}(\text{gluc})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2[\text{VO}(\text{sacar})_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{K}_5[\text{VO}(\text{sacar})_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ . Los mismos fueron caracterizados por análisis elemental, espectroscopia electrónica y de infrarrojo y medidas de susceptibilidad magnética. En base a estos resultados se hacen propuestas estructurales y se discuten las características de coordinación del oxocación. Asimismo, se investigó el comportamiento térmico de todos los complejos a través de medidas de ATG y ATD.

Finalmente, se efectúan diversas comparaciones con sistemas relacionados.

I 14

**ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y ELECTROQUÍMICO  
DEL DIPICOLINATO CÚPRICO**

**Beatriz S. Parajón-Costa<sup>1</sup>, Claudia C. Wagner<sup>2</sup> y Enrique J. Baran<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> **Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR/CONICET, UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C.Correo 962, 1900-La Plata.  
E-mail: [beatrizp@quimica.unlp.edu.ar](mailto:beatrizp@quimica.unlp.edu.ar)**

<sup>2</sup> **Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, 7400-Olavarría.**

Los complejos metálicos del ácido picolínico (2-carboxipiridina), han venido despertando creciente interés durante los últimos años, debido a sus interesantes propiedades farmacológicas. Por este motivo, y en el marco de nuestros estudios sobre complejos de cobre con actividad farmacológica, hemos iniciado ahora el estudio del correspondiente compuesto de Cu(II), de fórmula  $[\text{Cu}(\text{pic})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . La estructura del mismo es conocida y fue confirmada por difracción de rayos X de polvos.

En esta comunicación presentaremos los resultados del análisis de sus espectros de infrarrojo y Raman así como de su comportamiento electroquímico, investigado a través de medidas de voltamperometría cíclica en N-N'-dimetilformamida, a diferentes velocidades de barrido, utilizando hexafluorofosfato de tetrabutilamonio como electrolito soporte, y empleando como electrodo de trabajo carbón vítreo o platino.

I 15

**LA ESTRUCTURA DEL GRUPO FeNO EN DOS ESTADOS  
EXCITADOS METAESTABLES (MS1 Y MS2) DEL  
Na<sub>2</sub>[Fe(CN)<sub>5</sub>NO]·2H<sub>2</sub>O**

**M. E. Chacón Villalba<sup>1</sup>, J. A. Güida,<sup>1,2</sup> E. L. Varetti<sup>1</sup> y P. J. Aymonino<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas,  
Universidad Nacional de La Plata, C.C. 962, 1900 La Plata.

<sup>2</sup> Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de Luján, 6700 Luján  
E-mail: [guida@quimica.unlp.edu.ar](mailto:guida@quimica.unlp.edu.ar)

La naturaleza de los dos estados excitados metaestables (MS1 y MS2) del ion [Fe(CN)<sub>5</sub>NO]<sup>2-</sup> a baja temperatura es aún motivo de controversia en la literatura. A fin de aportar datos experimentales y teóricos que ayuden a evaluar el problema, se ha efectuado un estudio utilizando espectroscopia de infrarrojo sobre la sal de sodio, natural e isotópicamente sustituida con <sup>15</sup>N ó <sup>18</sup>O. El estado MS1 se generó por irradiación de las muestras enfriadas a 77 K con la línea 488 nm de un láser de Ar<sup>+</sup>, mientras que el estado MS2 se obtuvo por irradiación con la línea 1064 nm de un láser de Nd-YAG de las muestras previamente excitadas al estado MS1.

La comparación de los números de onda y corrimientos isotópicos experimentales del grupo FeNO con los calculados utilizando métodos de la química cuántica (DFT), apoyan una estructura de enlace lineal Fe(η<sup>1</sup>-ON) para el estado MS1 y una estructura de enlace lateral Fe(η<sup>2</sup>-NO) para el MS2.

I 16

**INFLUENCIA DE LOS IONES CARBONATO Y NÍQUEL(II)  
EN LA FORMACIÓN DE APATITAS BIOLÓGICAS Y  
SINTÉTICAS**

**J.R. Guerra-López,<sup>1</sup> C.O. Della Védova,<sup>2,3</sup> J.A. Güida<sup>1,2</sup> y G. Punte<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Básicas, Universidad Nacional de Luján, rutas 5 y 7, Luján

<sup>2</sup>CEQUINOR, <sup>3</sup>LaSeISiC, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas,  
Universidad Nacional de la Plata, CC 962, 1900, La Plata.

<sup>4</sup>IFLP y LANADI, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas,  
Universidad Nacional de la Plata, CC 67, 1900, La Plata.

E-mail: [jguerra@coopenetlujan.com.ar](mailto:jguerra@coopenetlujan.com.ar)

En los tejidos óseos, el níquel se encuentra en muy baja concentración. El desarrollo de prótesis metálicas y la vinculación con la posibilidad de elusión de los iones metálicos constituyentes al fluido biológico, han despertado un interés creciente sobre el estudio de los efectos que distintos iones (cobre, cobalto, zinc, etc) presentan sobre los procesos de formación, estabilidad y/o transformación de los fosfatos de calcio.

En este trabajo se estudia el efecto que el níquel ejerce sobre los procesos de formación de fosfatos de calcio. Se puede concluir, que la formación de cálculos renales del tipo brushita está asociada con la disminución de concentración de CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> en el fluido biológico y que la formación de esta fase, se ve favorecida por la presencia de pequeñas concentraciones de níquel en solución.

I 17

## ESTUDIO VIBRACIONAL DE CÁLCULOS RENALES POR ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO

J.R. Guerra-López,<sup>1</sup> C.O. Della Védova,<sup>2,3</sup> J.A. Güida,<sup>1,2</sup> R. García,<sup>1</sup> R. Goddard<sup>4</sup> y G. Punte<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de Luján, rutas 5 y 7, Luján. <sup>2</sup>CEQUINOR, <sup>3</sup>LaSeISiC Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de la Plata, CC 962, 1900, La Plata. <sup>4</sup>Max-Planck-Institut fuer Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, Muelheim/ Ruhr 45470, Alemania, <sup>5</sup>IFLP y LANADI, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de la Plata, CC 67, 1900, La Plata.

E-mail: [jguerra@coopenetlujan.com.ar](mailto:jguerra@coopenetlujan.com.ar)

Con el objetivo de conocer las posibles causas de la formación de cálculos renales es necesario un estudio exhaustivo de su composición para realizar un diagnóstico preciso que permita un tratamiento adecuado que evite la recidiva y otras complicaciones. La espectroscopia de infrarrojo puede usarse con éxito para identificar compuestos inorgánicos formados en sistemas biológicos, sin embargo, las determinaciones pueden complicarse cuando aparecen las habituales mezclas de fases en este tipo de patología.

En este trabajo se ofrecen nuevas alternativas para el estudio de la composición de cálculos. Un aspecto importante de este estudio es la posibilidad de establecer algunos factores etiológicos relacionados con la formación de estos sistemas.

I 18

## SÍNTESIS Y BIOACTIVIDAD DE DOS NUEVOS COMPLEJOS DE VANADILO (IV) CON ANTIINFLAMATORIOS

María S. Molinuevo<sup>1</sup>, Susana B. Etcheverry<sup>1,2</sup> y Patricia A.M. Williams<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Cátedra de Bioquímica Patológica,

<sup>2</sup>Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR/CONICET, UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C. Correo 962, 1900- La Plata.

E-mail: [williams@quimica.unlp.edu.ar](mailto:williams@quimica.unlp.edu.ar)

Se sintetizaron los complejos de vanadilo(IV) con diclofenac sódico (2-[(2,6-dicloro-fenil)amino]fenil acetato) e indometacina (ácido 1-(4-clorobenzoil)-5-metoxi-2-metil-1H-indol-3-acético) usando como solvente alcohol n-butílico, en atmósfera de nitrógeno. Los complejos fueron caracterizados por análisis elemental, espectroscopia electrónica y de infrarrojo, medidas de susceptibilidad magnética y comportamiento térmico a través de medidas de ATG y ATD. La bioactividad de los complejos fue estudiada a través de sus efectos sobre la proliferación de dos líneas de células osteoblásticas en cultivo. Los resultados obtenidos se comparan con los de otros complejos de VO<sup>2+</sup> y diversos antiinflamatorios no esteroideos previamente reportados por nosotros.

I 19

## COMPLEJOS TERNARIOS DE IMIDAZOL Y ÁCIDO 2-OH-HIPÚRICO CON COBRE Y COBALTO

Evelina G. Ferrer<sup>1</sup>, Ana C. González Baró<sup>1</sup>, Eduardo E. Castellano<sup>2</sup>, Oscar E. Piro<sup>3</sup> y Patricia A.M. Williams<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR/CONICET, UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C. Correo 962, 1900- La Plata.

<sup>2</sup> Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, C.P. 369, 13560 São Carlos (SP), Brazil.

<sup>3</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata e Instituto IFLP(CONICET), C.C. 67, 1900 La Plata, Argentina.

E-mail: [evelina@quimica.unlp.edu.ar](mailto:evelina@quimica.unlp.edu.ar)

Se obtuvieron los compuestos de fórmula:  $[\text{Co}(\text{OH-hip})(\text{Imz})_3]\cdot\text{H}_2\text{O}$  y  $[\text{Cu}(\text{OH-hip})(\text{Imz})_2]_2$  y se determinaron sus estructuras cristalinas. Se caracterizaron mediante las siguientes técnicas físicoquímicas: espectroscopias electrónica, de reflectancia difusa e infrarrojo; comportamiento térmico (TGA - DTA) y magnético.

El sistema  $\text{Cu}^{2+}/\text{OH-hip}/\text{Imz}/\text{H}^+$  en solución fue estudiado mediante titulaciones potenciométricas. Se determinó la distribución de especies y se calcularon las constantes de equilibrio de las especies complejas presentes.

I 20

## PREPARACIÓN DE MATRICES POROSAS DE SÍLICA EN SOLUCIONES MICELARES

Magalí Lovino, M. Fernanda Cardinal, M. Dolores Perez y Delia Bernik.

INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Univ. de Buenos Aires.  
Pabellón II, 3<sup>er</sup> Piso, Ciudad Universitaria, C1428EHA. Buenos Aires, Argentina.

E-mail: [mlovino@hotmail.com](mailto:mlovino@hotmail.com)

**Objetivo:** sintetizar matrices porosas de sílica dopadas con distintos aditivos biológicamente compatibles que permitan mejorar las propiedades elásticas del material. Se polimerizó tetraetóxido de silicio (TEOS) en distintas condiciones:

I- En soluciones micelares de Tween 80 y CTAB, la microscopía de fuerza atómica muestra en cada caso tamaños de partícula polimérica y poro diferente (figura 1).

II- En microemulsiones ternarias (micelas de CTAB, alcoholes) IIa-a pH neutro, obteniéndose partículas de hasta 2  $\mu\text{m}$  de diámetro observadas por microscopía óptica, cuyo tamaño aumenta con el tiempo hasta la formación de filamentos (figura 2). Estudios de microscopía de fluorescencia marcando las micelas con 5(6)-carboxyfluoresceína (CF) y con octadecilrodamina (R18) sugieren que la hidrólisis y polimerización de TEOS se realiza en la interfase orgánico-acuosa, atrapando la sonda R18 cuya estructura de tipo detergente se integra a la micela inversa. IIb-La catálisis ácida permite obtener geles ópticamente transparentes perfectamente homogéneos. Dichos geles fueron calcinados en mufla a 700°C obteniéndose un sólido poroso blanco. Estudios de difracción de rayos X indican que se trata de un sólido amorfo, con una banda ancha con máximo a 20°. Al presente se desarrollan estudios de adsorción de nitrógeno para determinar la porosidad de las muestras en todos los casos descriptos.

I 21

**SÍNTESIS DE ESPINELAS DE MAGNESIO (MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) A PARTIR DE REACCIÓN SÓLIDO-SÓLIDO EN LA PRESENCIA DE LOS CATIONES Li<sup>+</sup>, K<sup>+</sup> Y Cl<sup>-</sup>**

**Fabiola J. Alvarez<sup>1</sup>, Ana E. Bohé<sup>2</sup>, Daniel M. Pasquevich<sup>1,2</sup>**

**1 CNEA, Complejo Tecnológico Pilcaniyeu, Centro Atómico Bariloche, Avda. Bustillo km. 9,500 (8400) Bariloche, Río Negro, Argentina.**

**2 CONICET, Centro Atómico Bariloche.**

**alvarezf@cab.cnea.gov.ar**

La espinela de magnesio (MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) es un cerámico de alta resistencia mecánica, por lo que resulta de interés para su uso como aislante térmico de piezas con requerimientos especiales. En el presente trabajo se profundizó en el conocimiento de la interacción de la alúmina con los cationes Li<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup> y Cl<sup>-</sup> con el objetivo de analizar el mecanismo de formación de la espinela de magnesio. Estas reacciones heterogéneas sólido-sólido tienen lugar a temperaturas inferiores a 1000° C. En este estudio diferentes concentraciones de los sistemas: Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + MgO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + LiCl, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + MgCl<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + MgO + LiCl y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + MgO + KCl, fueron sometidos a tratamientos térmicos a 950° C durante distintos periodos. Las fases obtenidas fueron caracterizadas por espectroscopía dispersiva en energía (EDE/EDS) y difracción de rayos x (DRX/XRD), la evolución de la estructura fue seguida por microscopía electrónica de barrido (MEB/SEM). De los resultados alcanzados cabe destacar los siguientes: 1) El calentamiento directo de la mezcla de los óxidos MgO y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> no conduce a la formación masiva de la espinela de Mg, 2) La formación de la espinela MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> se ve promovida por la presencia de los cationes Li<sup>+</sup> o K<sup>+</sup>, los cuales incrementan la solubilidad del Al<sup>3+</sup> en el MgO, 3) La espinela de Mg es también obtenida a partir de la mezcla Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + MgCl<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O, aún para cortos tiempos de calentamiento. La presencia de iones Cl<sup>-</sup> beneficia la difusión de Mg<sup>2+</sup> en la estructura de la alúmina. 4) Se encontraron dos mecanismos de formación de la espinela de magnesio.

I 22

**ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN DE DIOXO COMPLEJOS DE Re(V) CON SERO-ALBÚMINA BOVINA**

**Fernanda Cerdá<sup>1</sup>, Eduardo Méndez<sup>1</sup>, Jorge S. Gancheff<sup>2</sup>, Carlos Kremer<sup>2</sup>, Ana M. Castro Luna<sup>3</sup>.**

<sup>1</sup> Lab.de Electroquímica, Facultad de Ciencias. Iguá 4225. 11400 Montevideo. UY

<sup>2</sup> Cát.Q. Inorgánica, Facultad de Química. Gral. Flores 2124. CC 1157 Montevideo. UY

<sup>3</sup> INIFTA, Universidad Nacional de La Plata. Sucursal 4-CC 16, 1900 La Plata. AR

**fcerda@fcien.edu.uy**

El porcentaje de unión a sero-albúmina bovina fue determinado mediante el uso de medidas voltamperométricas para complejos del tipo [ReO<sub>2</sub>(LL)]<sup>+</sup>, con LL = dien (dietilentriamina), tren (N-tris(2-aminoetil)amina) y trien (trietilentetramina). La interacción entre estos complejos y la proteína es principalmente electrostática. Además, presentan ligandos con grupos amino terminales libres que pueden formar enlaces con grupos funcionales de los aminoácidos que constituyen la proteína. El electrodo de trabajo fue uno de carbono vítreo. Las medidas se realizaron en soluciones acuosas de NaClO<sub>4</sub>, a pH fisiológico, luego de incubar la proteína con el complejo durante un lapso no menor a 60 minutos, en un baño a 37 °C. El método utilizado se basa en la comparación del coeficiente de difusión correspondiente al complejo libre y aquel del complejo conjugado a la proteína, ya que cuando se establece dicha interacción la especie resultante difunde con más lentitud que la especie libre. La aplicación de esta metodología requiere que el proceso global sea controlado por la difusión. Para los tres complejos estudiados, el porcentaje de interacción resultó ser mayor al 50 %. En los tres casos además, se observó un desplazamiento del valor del potencial del pico anódico correspondiente al proceso Re(V) → Re(VI) hacia potenciales menores (en aproximadamente unos -130 mV) luego de producirse la interacción con la proteína. Esto muestra que la magnitud de la interacción con la macromolécula depende de la carga total del complejo, determinada a su vez por el estado de oxidación del metal.

I 23

**CARACTERIZACION Y REACTIVIDAD QUÍMICA DE  
LA NUEVA FAMILIA DE COMPLEJOS  
[(RNCHCHNR)Co(CO)(NO)]**

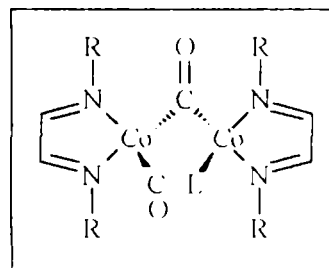
**Florencia Di Salvo<sup>1</sup>, Fabio Doctorovich<sup>1</sup> y Monika Sieger<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> DQIAQF/INQUIMAE, FCEyN, UBA, C. U., Pab. II (C1428EHA), Bs. As., Argentina.

<sup>2</sup>Institut für Anorganische Chemie, Universität Stuttgart, Stuttgart, Alemania.  
flor@qi.fcen.uba.ar

Se ha sintetizado una nueva familia de complejos de Co. [(RNCHCHNR)Co(CO)(NO)], donde R=isopropil, toluil, 2,4-diisopropilbencilo. Estos complejos son utilizados como modelos de sitios activos de enzimas de Co.

La caracterización espectroscópica, voltamperométrica y cristalográfica de los mismos mostró que el ligando NO posee potenciales propiedades nucleofílicas. En virtud de ello, se ha estudiado la reacción frente al potente electrófilo Et<sub>3</sub>O<sup>+</sup> (como sal de SbF<sub>6</sub><sup>-</sup>). El estudio espectroscópico de la reacción entre Et<sub>3</sub>O<sup>+</sup> y los complejos permitió postular un mecanismo de reacción que considera como único producto al dímero puenteado por CO. (ver figura) ( $\nu(\text{CO}_{\text{puente}})$ : 1819 cm<sup>-1</sup>,  $\nu(\text{CO}_{\text{terminal}})$ : 1887 cm<sup>-1</sup> para R = 2,4-diisopropilbenceno). Por los datos obtenidos, se trataría de un CO fluxional, dado que por RMN <sup>13</sup>C se observa una sola señal correspondiente a los carbonos del NCHCHN (155 ppm), acorde a dos ligandos equivalentes. Para el caso particular de R = 2,4-diisopropilbenceno, la rotación restringida se pone en evidencia en sendos juegos de señales dobles tanto para los carbonos del arilo como para los del isopropilo. Estos resultados, se han comparado con los datos del ligando libre, donde solo las señales de los carbonos alifáticos se encuentran duplicadas. Basándonos nuevamente en los datos espectroscópicos (FT-IR, RMN <sup>13</sup>C y <sup>1</sup>H), el ligando L podría asignarse a CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>NO.



I 24

**REACCION INESPERADA DE CICLOPROPILAMINA  
CON Fe(CN)<sub>5</sub>NO<sup>2-</sup>**

**Javier A. Bocchio, Fabio Doctorovich**

**Lab. Química Organometálica, INQUIMAE, DQIAyQF.**

**FCEN, UBA, C.U., Pab. II, Piso 3, (C1428EHA) Buenos Aires, Argentina  
bocchioj@yahoo.com.ar**

La reacción de ciclopropilamina (cpNH<sub>2</sub>) con [Fe(CN)<sub>5</sub>NO]<sup>2-</sup> (nitroprusiato) tanto en solución acuosa como en acetonitrilo, da lugar a un producto de reacción rojo ( $\lambda$  500 nm), a diferencia de los aminocomplejos amarillos [Fe(CN)<sub>5</sub>(RNH<sub>2</sub>)]<sup>3-</sup> ( $\lambda$  395 nm p/ RNH<sub>2</sub> = etilamina) observados en las reacciones de NH<sub>3</sub> y aminas alifáticas como por ejemplo butilamina y bencilamina.

La reacción es exotérmica, hay desprendimiento de gases, y se observa un cambio rápido de color del inicialmente casi iricoloro a violeta y luego a rojo oscuro ( $\lambda$  500 nm). El IR de la solución roja muestra una señal correspondiente a cianuros de Fe<sup>2+</sup> a 2035 cm<sup>-1</sup> y una señal a 1650 cm<sup>-1</sup>. Tanto la coloración del producto como la señal de IR a 1650 cm<sup>-1</sup> indican la presencia de un compuesto C-nitroso. La formación del producto rojo depende fuertemente de la relación inicial complejo:amina. Con una relación 1:10 se observa la banda a 391 nm ( $\epsilon \approx 400$ ) correspondiente a [Fe(CN)<sub>5</sub>(cpNH<sub>2</sub>)]<sup>3-</sup>; con 1:1 se observa el producto rojo ( $\epsilon \approx 485$ ) y con 1:3 se observan ambos. En los espectros de <sup>1</sup>H-RMN determinados para la solución roja, se observan señales a 2,6 ppm y 0,7 ppm donde el anillo ciclopropilo se encuentra intacto (posiblemente el amino coordinado) y también se observan señales a 1,0 y 4,1 ppm, probablemente correspondientes a un compuesto C-nitroso de cadena abierta. Por agregado de etanol a la solución roja, se obtiene un precipitado azul, que por microanálisis se identificó como un azul de prusia NaFe<sup>III</sup>[Fe<sup>II</sup>(CN)<sub>6</sub>]<sup>4-</sup> · 4H<sub>2</sub>O.

I 25

**PREPARACIÓN Y PROPIEDADES  
DE LA N-ACETILSULFANILAMIDA DE CU(II)**

**Pereyra, Valeria; Castillo, Dina ; Michel, Alejandra;  
Cruz, Karina; Morán, Juana A. de**

**Cátedra de Química Inorgánica -Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia  
Universidad Nacional de Tucumán  
Ayacucho 491- 4000 - San Miguel de Tucumán – Argentina  
Email: jamoran@unt.edu.ar**

Se informa en el presente trabajo la obtención y propiedades de la sal de Cu(II) de la N-acetilsulfanilamida.

El compuesto se prepara por mezcla de soluciones de sulfato de cobre(II) y sulfacetamida de sodio en proporciones estequiométricas, obteniéndose un precipitado pulverulento verde grisáceo. La caracterización espectroscópica vibracional muestra las bandas características de las sulfonamidas.

Se estudiaron los precipitados obtenidos a temperatura ambiente, a 50°C y el envejecido durante 60 días en presencia de las aguas madres.

Se determinó para cada uno de ellos el área superficial específica, la densidad y la solubilidad del compuesto en metanol y dioxano (en el intervalo de 20° a 40°C ).

Se analizó el proceso de descomposición térmica de la N-acetilsulfanilamida de Cu(II). Como es característico para los compuestos que forman las sulfonamidas con los elementos de transición, la pirólisis conduce, a temperaturas relativamente bajas, a la formación de CuO.

I 26

**ESTUDIO DE LA SOLUBILIDAD DE Al EN SnO<sub>2</sub> EN  
POLVOS SINTETIZADOS POR GELIFICACIÓN-  
COMBUSTION**

**R.E. Baby<sup>1,2</sup>, M.D. Cabezas<sup>1</sup>, D.G. Lamas<sup>1</sup>, E.D. Cabanillas<sup>3</sup> y N.E. Walsøe de Reca<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>CINSO (Centro de Investigaciones en Sólidos), CITEFA - CONICET  
Juan Bautista de La Salle 4397, (B1603ALO) Villa Martelli, Pcia. de Bs. As.  
E-mail: dlamas@citefa.gov.ar**

**<sup>2</sup>UTN (Universidad Tecnológica Nacional) - FRBA**

**<sup>3</sup>Dto. Combustibles Nucleares, CNEA - CONICET**

Los semiconductores basados en SnO<sub>2</sub> son empleados como sensores de gases inflamables (CO, CH<sub>4</sub>, etc). Dado que el mecanismo de sensado se basa en reacciones superficiales entre adsorbatos de O<sub>2</sub> (que cubren la superficie cuando el sensor está expuesto al aire) y el gas de interés, el tamaño de cristalita tiene gran relevancia en la sensibilidad. Por ello, los métodos de síntesis de polvos nanocristalinos de SnO<sub>2</sub>, puro o dopado, se estudian intensamente. De los numerosos dopantes analizados, se ha encontrado que los metales trivalentes aumentan la sensibilidad. Sin embargo, el Al ha dado resultados difíciles de comprender, ya que se observa un aumento importante en la sensibilidad, pero tiene un muy bajo límite de solubilidad en la red cristalina del SnO<sub>2</sub> (menor al 1 %at.). Se cree que su efecto es inhibir el crecimiento de las cristalitas de SnO<sub>2</sub>.

En este trabajo se estudió la incorporación de Al en la red de SnO<sub>2</sub> por el método de gelificación-combustión empleando ácido cítrico como combustible. La concentración de Al se varió hasta 25 %at. Los polvos obtenidos fueron caracterizados por difracción de rayos X, análisis dispersivo en energía y microscopias electrónicas de barrido y de transmisión. Los resultados obtenidos indican que el Al se incorpora en la red del SnO<sub>2</sub> en bajas proporciones, quedando segregado Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> amorfo. Se lograron tamaños de cristalita extremadamente pequeños, entre 5 y 9 nm.

I 27

**FORMA t'' DE LA FASE TETRAGONAL EN SOLUCIONES  
SÓLIDAS HOMOGÉNEAS EN COMPOSICIÓN  
DE ZrO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub>**

G.E. Lascalea<sup>1</sup>, D.G. Lamas<sup>1</sup>, M.E. Rapp<sup>1</sup>, E. Djurado<sup>2</sup> y N.E. Walsøe de Reca<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CINSO (Centro de Investigaciones en Sólidos), CITEFA - CONICET

Juan Bautista de La Salle 4397, (B1603ALO) Villa Martelli, Pcia. de Bs. As.

E-mail: dlamas@citefa.gov.ar

<sup>2</sup>LEPMI, INPG-CNRS, Grenoble, Francia

Una de las características más notables de diversos sistemas basados en ZrO<sub>2</sub> (ZrO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>-Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZrO<sub>2</sub>-CaO, etc.) es la existencia de tres formas de la fase tetragonal, llamadas *t*, *t'* y *t''*, todas ellas correspondientes al grupo espacial *P4<sub>2</sub>nm*. Esto ocurre en materiales homogéneos en composición, aún para concentraciones del dopante que corresponden a mezcla de fases según el diagrama de equilibrio. La forma tetragonal estable se llama forma *t* y está restringida al límite de solubilidad predicho por el diagrama de fases. Existe también una forma *t'* con solubilidad mayor, pero que es inestable en comparación con la mezcla de las fases tetragonal y cúbica. Por último, la forma *t''* tiene cociente axial unitario, pero con los aniones O<sup>2-</sup> están desplazados de su posición de la fase cúbica (sitios 8c del grupo espacial *Fm $\bar{3}$ m*) a lo largo del eje *c*.

En este trabajo se presenta un estudio estructural de polvos nanocrystalinos homogéneos en composición de ZrO<sub>2</sub> - 50, 70 y 90 %molar CeO<sub>2</sub> sintetizados por gelificación-combustión. Mediante el análisis por difracción de rayos X por el método de Rietveld se encontró que los polvos de ZrO<sub>2</sub> - 70 %molar CeO<sub>2</sub> tienen cociente axial *c/a* = 1, con los aniones O<sup>2-</sup> desplazados en 0.144 Å a lo largo del eje *c*. En cambio, los polvos de ZrO<sub>2</sub> - 90 %molar CeO<sub>2</sub> presentaron la fase cúbica y los de ZrO<sub>2</sub> - 50 %molar CeO<sub>2</sub> presentaron la forma *t'*, con *c/a* = 1.033. Estos resultados fueron verificados por espectroscopia Raman.

I 28  
ORAL

**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS  
TRINUCLEARES DE FÓRMULA *trans*-[Fe<sup>III</sup>-μ-CN-  
M<sup>III</sup>(cyclam)-NC-μ-Fe<sup>III</sup>(CN)<sub>5</sub>]<sup>-3</sup>, M= Co, Cr, Ru y cyclam=  
1,4,8,11-tetraazaciclotetradecano.**

J. Petrone<sup>1</sup>, P. Alborés,<sup>1</sup> L. D. Slep,<sup>2</sup> T. Weyhermüller<sup>2</sup> y Luis M. Baraldo.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>-INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.

Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.

<sup>2</sup>-Max-Planck-Institut für Strahlenchemie, Stiftstraße 34-36, D-45470 Mülheim an der Ruhr, Germany  
baraldo@qi.fcen.uba.ar

El descubrimiento de que algunos clústeres de iones paramagnéticos, como el "Mn<sub>12</sub>" pueden exhibir propiedades similares a magnetos de escala nanoscópica ha despertado un gran interés en la síntesis de arreglos de iones paramagnéticos que presenten estados fundamentales magnéticamente anisotrópicos y con spin (*S*) grande. Los clústeres de iones paramagnéticos unidos por puente cianuro ofrecen una ruta atractiva para la síntesis racional de esta clase de compuestos. En esta comunicación presentaremos la preparación y caracterización de aniones conteniendo el motivo Fe<sup>III</sup>-CN-M<sup>III</sup>-NC-Fe<sup>III</sup> (con M = Co, Cr y Ru) y diez cianuros terminales. La presencia de los cianuros terminales nos permitirá utilizar a estos compuestos en la preparación de clústeres de mayor nuclearidad.

La reacción de los monómeros precursores *trans*-[M(cyclam)Cl<sub>2</sub>]<sup>+</sup> en medio acuoso con exceso de [Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>4-</sup> da lugar a los trimeros de valencia mixta Fe<sup>II</sup>-M<sup>III</sup>-Fe<sup>II</sup>.

Caracterizaremos estos compuestos por espectroscopia UV-vis, de infrarojo, por estudios electroquímicos (en particular voltametría cíclica y voltametría diferencial de pulso), análisis elemental y difracción de rayos X de monocristales.

I 29

**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LA FAMILIA DE COMPUESTOS *trans*-Ru(L)<sub>4</sub>X<sub>2</sub>, L=4-tBuPy, 4-MeOPy Y 4-DMAPy ; X=Cl<sup>-</sup>, CN<sup>-</sup>, SCN<sup>-</sup>.**

**G. Pierslinger,<sup>1</sup> P. Alborés,<sup>1</sup> Z. D. Chaia<sup>1</sup>, O. E. Piro<sup>2</sup> y, L. M. Baraldo.<sup>1</sup>**

**1-INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.**

**Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.**

**2-Departamento de Física-Fac.Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La**

**Plata(CONICET-UNLP).C. C. 67. (1900) La Plata**

**baraldo@qi.fcen.uba.ar**

El fragmento Rupy<sub>4</sub> puede emplearse como puente para unir dos ciano complejos, manteniendo la geometría *trans* alrededor del Ru. Una característica atractiva del uso de la piridina como ligando es que se pueden cambiar sus propiedades electrónicas a través de la introducción de sustituyentes. En esta comunicación presentaremos la preparación y caracterización de la familia de compuestos Rupy<sub>4</sub>X<sub>2</sub> con piridinas sustituidas en para. Estos compuestos nos permiten disponer de una familia de fragmentos metálicos de geometría *trans* que presentan diferente densidad electrónica sobre el metal.

La reacción del *trans*-Ru(dmsO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> en reflujo de etanol en presencia de un exceso de L (L=piridina sustituida) permite separar el Ru(L)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> como un sólido cristalino naranja. La reacción con 4-dimetilaminopiridina (4-DMAPy) arroja como producto [Ru(DMAPy)<sub>6</sub>]Cl<sub>2</sub>.

La posterior reacción en metanol a reflujo de el dicloro complejo en presencia de un exceso de X(CN<sup>-</sup>,SCN<sup>-</sup>) permite obtener los complejos *trans* disustituidos. Estos compuestos se caracterizaron por espectroscopia UV-vis, infrarrojo, electroquímica y difracción de rayos X de monocristales.

I 30

**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CLÚSTERES CONTENIENDO IONES Cr(III) UNIDOS POR PUENTES CIANURO**

**Melina B. Rossi, , Pablo Alborés y Luis M. Baraldo.**

**INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.**

**Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.**

**baraldo@qi.fcen.uba.ar**

Una estrategia exitosa para la obtención de clústeres de iones paramagnéticos con momentos de spin grande consiste en unir varios iones con varios electrones desapareados (Mn<sup>II</sup>, Fe<sup>III</sup> de altos spin) a un mismo ciano-complejo de un ion paramagnético (por ejemplo [Cr<sup>III</sup>(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup>) a través de puentes cianuro. Esta estrategia garantiza que los spines de todos los iones unidos al extremo nitrilo del cianuro resulten paralelos, alcanzándose un S = 27/2 para el Mn,Cr. Incorporación de iones Cr<sup>III</sup> en reemplazo de Fe<sup>III</sup> o Mn<sup>II</sup> nos permitirá preparar clústeres que retengan su identidad en solución, lo que permitirá su uso como precursores de arreglos de mayor nuclearidad.

En esta comunicación presentaremos la preparación y caracterización de complejos del tipo Cr<sup>III</sup>LCI. (L es un ligando pentadentado como el bis (2-salicilidenaminoetil)amina) aptos para coordinar grupos cianuro terminales

La reacción de Cr<sup>III</sup>LCI en medio acuoso con exceso de [Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>4-</sup> da lugar al dímero [LCrNCFe(CN)<sub>5</sub>]<sup>3-</sup>. La posterior oxidación del Fe<sup>II</sup> permite obtener el compuesto mencionado como sal de TPP (tetrafenilfosfonio). Este dímero es un buen modelo para caracterizar el acoplamiento magnético entre el Cr<sup>III</sup> y el Fe<sup>III</sup>

Caracterizaremos este dímero por espectroscopia UV-vis, de infrarrojo, por estudios electroquímicos (en particular voltametría cíclica y voltametría diferencial de pulso) y análisis elemental.

I 31

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA NUEVA SERIE DE COMPLEJOS DE OSMIO TRANS SUSTITUIDOS

Martín Gaitán,<sup>1</sup> L. D. Slep,<sup>2</sup> T. Weyhermüller<sup>2</sup> y Luis M. Baraldo.<sup>1</sup>

1-INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.

Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.

2-Max-Planck-Institut für Strahlenchemie, Stiftstraße 34-36, D-45470 Mülheim an der

Ruhr, Germany

baraldo@qi.fcen.uba.ar

Los complejos de fórmula general  $trans-[M(CN)_4L_2]^{2-}$  son atractivos como unidades de construcción ("building blocks") de materiales moleculares ya que su geometría sugiere que su reacción con metales lábiles podría generar laminas con una estructura cúbica similar a la de los azules de Prusia. Esta estructura es atractiva para generar monocapas o sólidos laminares con propiedades muy anisotrópicas. En esta comunicación presentamos la síntesis y caracterización de la familia de compuestos,  $trans-[Os(CN)_4L_2]^{2-}$  (con L = un heterociclo sustituido) que constituye el primer ejemplo de una familia de compuestos con esta geometría.

El agregado de hidroxilamina sobre una solución de  $trans-[Os^{VI}(CN)_4O_2]^{2-}$  produce un intermediario de Os(II) no caracterizado aún, que sirve como un versátil material de partida para la síntesis de compuestos de esta familia, tal como lo demuestra la caracterización de los compuestos con L = piracina, isonicotinamida y N-metil-4,4' bipyridina. Estos compuestos se caracterizaron por análisis elemental, espectroscopia UV-vis, infrarroja, RMN, electroquímica, y difracción de rayos X de monocristales en el caso del derivado de piracina.

Discutiremos las propiedades de estos compuestos comparándolas con los análogos de la familia  $[Os(CN)_5L]^{3-}$ .

I 32

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NITROSIL-COMPLEJOS CONTENIENDO 2, 2' AZOBIS(PIRIDINA)

Martín Gaitán,<sup>1</sup> Wolfgang Kaim<sup>2</sup> y Luis M. Baraldo.<sup>1</sup>

1-INQUIMAE-Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA.

Pabellón 2, Ciudad Universitaria, C1428EHA, Ciudad de Buenos Aires.

2- Institut für Anorganische Chemie, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 55,

D-7000 Stuttgart 80, Germany.

baraldo@qi.fcen.uba.ar

El ligando 2, 2' azobis(piridina) (a-bpy) es un ligando puente de características inusuales. Es capaz de unir dos iones metálicos a través de dos posiciones de coordinación, por lo que resulta atractivo para generar sistemas binucleares robustos. Electrónicamente, este ligando posee orbitales vacantes de baja energía, por lo tanto es fácilmente reducible. Forma complejos estables con el  $Ru^{II}$  donde se comporta como un ligando muy aceptor de electrones. El comportamiento del ion nitrosilo frente al  $Ru^{II}$  presenta similares características, siendo también muy aceptor y fácilmente reducible. La forma reducida de un complejo donde ambos ligandos están coordinados a un mismo rutenio puede presentar el electrón impar localizado en uno de los aceptores o deslocalizado sobre ambos.

Hemos preparado y caracterizado una serie de complejos mononucleares y dinucleares conteniendo el ion nitrosilo y a-bpy en la esfera de coordinación de un  $Ru^{II}$ . Estos compuestos fueron caracterizados por análisis elemental, espectroscopia UV-vis, de infrarrojo y por estudios electroquímicos (en particular voltametría cíclica y voltametría diferencial de pulso). La forma reducida de estos complejos fue caracterizada espectroscópicamente. La señal de epr de los productos reducidos nos permite asignar la naturaleza electrónica de este estado.

I 33

**SÍNTESIS DE ARCILLAS PILAREADAS: INFLUENCIA DE LA CANTIDAD DE  $Al^{3+}$  INCORPORADO**

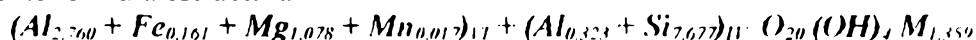
Mara Dávila, Cecilia Solar y Karim Sapag

Laboratorio de Ciencia de Superficies y Medios Porosos.

Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco 917. CP 5700 San Luis.

E-mail: [sapag@unsl.edu.ar](mailto:sapag@unsl.edu.ar)

Las arcillas pilareadas. (PILCs), son obtenidas a partir de filosilicatos naturales, intercambiando sus cationes naturales por grandes oligocaciones obtenidos a partir de la hidrólisis de las sales correspondientes. Después de un proceso de secado y calcinación, esos hidroxycationes se convierten en "pilares" manteniendo las láminas de la arcilla separadas, formando un material con estructura porosa bidimensional. Entre los oligocaciones más estudiados, se encuentra el aluminio, donde en su preparación, además de la concentración, temperatura y tiempo de envejecimiento, los parámetros más importantes son la relación de basicidad OH/Al y la concentración final del metal. Por otro lado, la arcilla natural de partida está caracterizada por su capacidad de intercambio catiónico (CEC), medida en miliequivalentes por gramo de arcilla, y tendría que ser el limitante de la cantidad de cationes a incorporar. Incorporaciones mayores a su CEC, podría alterar la densidad de pilares, o producir cambios sustanciales tanto en la textura como estructura del material final. En este trabajo, se utilizó como material de partida una arcilla montmorillonítica natural de la provincia de San Juan, con la siguiente fórmula estructural:



donde M corresponde a los cationes intercambiables: Ca, Na, K y Mg en este caso.

A partir de este material y oligocaciones preparados a partir de  $AlCl_3$  y NaOH, se sintetizaron y caracterizaron distintos materiales con una relación de basicidad OH/Al=2 y distintas relaciones  $Al^{3+}$  / g de arcilla, estudiando los cambios producidos en el material final. Por medio de DRX, Sorción de  $N_2$  y análisis térmico diferencial y termogravimétricos, se siguieron los cambios texturales y estructurales producidos en cada caso, sacando las conclusiones correspondientes.

I 34

**SÍNTESIS Y PROPIEDADES DE COMPLEJOS SULFATIAZOL-COBALTO**

S. Bellú<sup>1</sup>, E. Hure<sup>1</sup>, G. Molina<sup>1</sup>, M. Trapé<sup>1</sup>, C. Trossero<sup>1</sup>, P. Williams<sup>2</sup>, G. Picó<sup>3</sup>,  
A. Levina<sup>4</sup>, M. Rizzotto<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Área Inorgánica, FCByF, UNR, Suipacha 531, 2000 Rosario

<sup>2</sup>CEQUINOR, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP

<sup>3</sup>Cátedra de Fisicoquímica, FCByF, UNR

<sup>4</sup>School of Chemistry, University of Sydney, NSW 2006

[mrizzot@agatha.unr.edu.ar](mailto:mrizzot@agatha.unr.edu.ar) (Marcela Rizzotto)

Continuando con el estudio de la interacción entre iones metálicos y drogas sulfá, se obtuvieron complejos mezclando soluciones acuosas de Co(II) y de sulfatiazol sódico (NaST), con agregado de  $H_2O_2$  para lograr los de Co(III). Las fórmulas:  $[Co(ST)_2(H_2O)_4]$  para el complejo de Co(II) y  $[Co(ST)_2(OH)(H_2O)_3]$  para el de Co(III) están de acuerdo con los respectivos análisis elementales y termogravimétricos. Los estudios practicados (espectroscopia infrarroja -entre 4000 y 400  $cm^{-1}$ , en pastillas de KBr- y electrónica: reflectancia difusa -entre 400 y 900 nm-, en solución metanólica -entre 225 y 800 nm-, y en DMSO, entre 300 y 800 nm-, resonancia paramagnética electrónica, en solución congelada a 77 K: susceptibilidad magnética) permiten sugerir para ambos compuestos la coordinación del ion metálico a través del átomo de nitrógeno tiazólico, con una geometría octahédrica alrededor del metal. Interacción con albúmina sérica bovina (SAB): ambos complejos extinguieron parcialmente la fluorescencia nativa de la SAB a 340 nm ( $\lambda$  excitación: 300 nm), sugiriendo una interacción específica con la proteína.

I 35  
ORALURACILATOS Y 5-HALOURACILATOS DE NI(II), CU(II)  
Y ZN(II): SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN  
ESPECTROSCÓPICA Y ESTRUCTURALSimón Amengual<sup>1</sup>, María C. Apella<sup>2,3</sup>, Francisco Caldentey<sup>1</sup>, Ángel García-Raso<sup>1</sup>,  
Juan J. Fiol<sup>1</sup>, Ángel Terrón<sup>1</sup> y Roxana M. Tótar<sup>2,3</sup><sup>1</sup>Departamento de Química, UIB, Mallorca, España; <sup>2</sup>CERELA, Chacabuco 145  
(4000) S. M. de Tucumán, Argentina; <sup>3</sup>Facultad de Cs. Naturales e IML, UNT  
Correo electrónico: [mapella@cerela.org.ar](mailto:mapella@cerela.org.ar)

Una terapia habitual, en el tratamiento de ciertos tipos de cáncer, es usar el efecto sinérgico del cis-platino y 5-fluorouracilo. No obstante, es limitado el conocimiento de los compuestos de coordinación que forman los 5-haloderivados del uracilo y la actividad antineoplásica de los mismos. Por tales motivos, nos interesamos en el estudio de los uracilatos y 5-halouracilatos de algunos cationes metálicos de transición.

Se sintetizaron los complejos de uracilato (ura) y X-uracilato (X-ura) con X: F, Cl, Br e I de Ni(II), Cu(II) y Zn(II). La caracterización se realizó mediante análisis elemental, termogravimetría, espectroscopia IR y RMN.

El estudio de difracción de rayos-X de  $[\text{Cu}(\text{ura})_2(\text{NH}_3)_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$  mostró que la geometría de coordinación alrededor del Cu(II) es plano cuadrada distorsionada a diferencia del entorno que este catión presenta en  $[\text{Cu}(\text{F-ura})_2(\text{NH}_3)_2(\text{H}_2\text{O})]$ , determinada por otros autores como una pirámide de base cuadrada. El Zn(II) en  $[\text{Zn}(\text{Cl-ura})(\text{NH}_3)_2](\text{Cl-ura})(\text{H}_2\text{O})$  presenta una coordinación tetraédrica. El Zn(II) se une a tres grupos amino y al N(1) del clorouracilo. Este complejo monocationico reconoce, a través de dos enlaces hidrógeno, al anión uracilato con el N(1) desprotonado. Los planos de las bases coordinada y libre son paralelas pero no coincidentes.

I 36

COMPLEJOS DE LAPACHOLATO Y COBALTO(II) CON  
DIMETILFORMAMIDA Y AGUA:  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{DMF})_2]$   
y  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2(\text{DMF})$ Miguel A. Martínez<sup>a,\*</sup>, María C.L. de Jiménez<sup>a</sup>, Eduardo E. Castellano<sup>b</sup>, Oscar E. Piro<sup>c</sup>  
y Pedro J. Aymonino<sup>d</sup><sup>a</sup>Fac. de Bioq., Quím. y Farm., UNT, Ayacucho 491, 4000 Tucumán, Argentina. <sup>b</sup>Inst. de  
Fís. de São Carlos, Univ. de São Paulo, C.P.369, 13560 São Carlos (SP), Brazil. <sup>c</sup>IFLP-  
LANADI (CONICET), Dep. de Fis., Fac. de C.E., UNLP, C.C. 67, 1900 La Plata,  
Argentina. <sup>d</sup>CEQUINOR y LANEFO (UNLP-CONICET), Dep. de Quím., Fac. de C.E.,  
UNLP, C.C. 962, 1900 La Plata, Argentina. \*E-mail: [mamarti@unt.edu.ar](mailto:mamarti@unt.edu.ar)

Se han sintetizado, por vez primera y determinado por DRX las estructuras cristalinas de dos complejos de cobalto(II) con el anión lapacholato (Lap),  $\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{O}_3$ , derivado del lapachol (2-hidroxi-3-(3-metil-2-butenil)-1,4-naftoquinona) y con dimetilformamida (DMF) y agua, respectivamente, como ligandos adicionales, de fórmulas  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{DMF})_2]$  (I) y  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{DMF}$  (II). Las dos sustancias son de intenso color rojo oscuro. El compuesto I se obtiene por reacción de lapachol con acetato de cobalto(II) en DMF y cristaliza en el grupo espacial triclinico P-1. El complejo II se prepara por reacción de lapachol disuelto en dimetilformamida con acetato de cobalto(II) en agua y cristaliza en el Grupo espacial monoclinico P21/n. En I y II la esfera de coordinación del metal es octaédrica, con dos lapacholatos ecuatoriales y dos moléculas de DMF y  $\text{H}_2\text{O}$  apicales, respectivamente; en II la DMF está unida al agua por puentes de hidrógeno. Los resultados de ATG y análisis químicos confirman las fórmulas asignadas a I y II y los espectros UV-VIS (dominados éstos por la fuerte absorción del anión lapacholato) e IR son los esperados para esas fórmulas.

I 37

### ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y ACTIVIDAD SUPERÓXIDO DISMUTASA DEL HIPURATO DE Cu(II)

**Mónica I. Rodríguez<sup>1</sup>, Silvia G. Manca<sup>1</sup>, Roxana M. Tótar<sup>2,3</sup> y Enrique J. Baran<sup>4</sup>**  
<sup>1</sup>Instituto de Química Analítica, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, UNT, 4000 S. M. de Tucumán; <sup>2</sup>CERELA; <sup>3</sup>FAZ, UNT; <sup>4</sup>CEQUINOR, UNLP  
 E. mail: [monami@unt.edu.ar](mailto:monami@unt.edu.ar)

Los hipuratos de metales de transición divalentes son sustancias que han sido estudiadas desde distintos aspectos físicoquímicos. En el presente trabajo se estudió el comportamiento espectroscópico del hipurato de Cu(II) - Cu (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CONHCH<sub>2</sub>COO)<sub>2</sub>·2.5H<sub>2</sub>O - y teniendo en cuenta que los complejos de Cu(II) pueden presentar actividad anticancerígena, se determinó su actividad superóxido dismutasa (SOD).

El espectro infrarrojo muestra las bandas características del ligando: estiramientos N-H (3317 - 3063 cm<sup>-1</sup>), estiramientos del grupo COO (ν<sub>as</sub>=1500-1600 cm<sup>-1</sup>; ν<sub>s</sub>= 1395-1420 cm<sup>-1</sup>), deformaciones de los grupos N-H y CH<sub>2</sub> (690-1300 cm<sup>-1</sup>) y de la coordinación Cu-O (559 cm<sup>-1</sup>). El análisis del espectro electrónico, en dimetilsulfóxido, permitió visualizar una banda en 799 nm con un coeficiente de extinción molar ε= 47 M<sup>-1</sup> cm<sup>-1</sup>, característica de la transferencia de carga metal-ligando.

La actividad SOD determinada como la concentración de Cu(II) que causa el 50% de inhibición del NBT (IC<sub>50</sub>) fue igual a 3,02·10<sup>-6</sup>. Este elevado valor indica que el complejo posee una alta capacidad para dismutar al anión superóxido generado en el sistema xantina/xantina oxidasa que podría ser una consecuencia del entorno del Cu(II).

I 38

### SINTESIS Y CARACTERIZACION DE COMPLEJOS

L<sub>5</sub>M-N≡N-Ar-N≡N-ML<sub>5</sub> (M= Ru, Ir)

**Natalia Escola y Fabio Doctorovich**

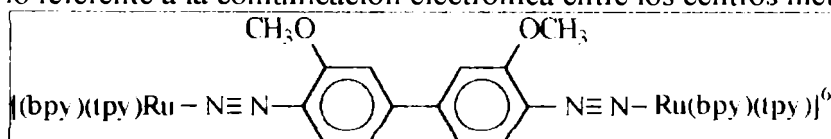
INQUIMAE-DQIAyQF, FCEN, UBAC.U. Pab. II (C1428EHA) Bs. Aires, Argentina  
[nescola@qi.fcen.uba.ar](mailto:nescola@qi.fcen.uba.ar)

La reacción de diazotación de una serie de diaminas aromáticas, principalmente p-fenilendiamina y o-dianisidina, por diferentes nitrosilos coordinados tales como [Ru(bpy)(tpy)(NO)](PF<sub>6</sub>)<sub>3</sub> y K[Ir(NO)Cl<sub>5</sub>], produce dímeros con centros metálicos Ru(II)-Ru(II), Ru(II)-Ir(III) o Ir(III)-Ir(III), vinculados a través de un ligando puente constituido por la molécula orgánica con dos grupos diazonio (N≡N) o diazoato (N=N(O<sup>-</sup>)) en sus extremos.

La caracterización de estos compuestos no resultó sencilla debido a la escasa solubilidad de los mismos en la mayoría de los solventes y a su rápida descomposición ante la presencia de nucleófilos o trazas de agua. El estudio de estos productos se llevó a cabo empleando espectroscopías RMN-<sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C, UV-visible, IR, Raman y microanálisis elemental.

Se prepararon también monómeros a partir de la reacción entre los mismos nitrosilos con p-aminopiridina en los cuales el ligando unido al metal a través del diazonio, presenta la posibilidad de coordinarse a otro centro metálico a través del nitrógeno de la piridina.

Actualmente, se encuentran en estudio las propiedades electroquímicas de estos compuestos especialmente en lo referente a la comunicación electrónica entre los centros metálicos.



I 39

## NUEVOS COMPLEJOS MONO- Y DI-NUCLEARES DE RENO Y RUTENIO CON LIGANDOS AROMÁTICOS

María G. Mellace<sup>1</sup>, Florencia Fagalde<sup>1</sup>, Néstor E. Katz<sup>1</sup>, Irma G. Crivelli<sup>2\*</sup>, Alvaro Delgadillo<sup>3</sup>, Ana María Leiva<sup>3</sup> y Bárbara Loeb<sup>3</sup>

\*Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 491, (T4000INI) S. M. de Tucumán, <sup>2</sup>Facultad de Ciencias, Universidad de Chile y <sup>3</sup>Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile

E-mail: [nkatz@arnet.com.ar](mailto:nkatz@arnet.com.ar)

Nuevos complejos mono- y di-nucleares de renio y rutenio con ligandos aromáticos fueron sintetizados como sólidos y caracterizados por análisis químicos, voltamperometría cíclica y espectroscopias de IR, UV-visible y RMN. La especie de fórmula  $[\text{Ru}(\text{bpy})_2(5\text{-CNphen})]^{2+}$  (con bpy = 2,2'-bipiridina y 5-CNphen = 5-ciano-1,10-fenantrolina) emite a temperatura ambiente en  $\text{CH}_3\text{CN}$ , con un rendimiento cuántico similar al del  $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ . Dicha luminiscencia es inhibida casi totalmente en el complejo de valencia mixta, de fórmula  $[(\text{NH}_3)_5\text{Ru}^{\text{III}}(5\text{-CNphen})\text{Ru}^{\text{II}}(\text{bpy})_2]^{3+}$ , indicando un eficiente proceso de transferencia intramolecular de electrones que sigue a la excitación luminosa. Por otra parte, la posición de la banda de intervalencia en la zona visible ( $\lambda_{\text{max}} \approx 800$  nm, en  $\text{CH}_3\text{CN}$ ) puede explicarse en base a la asimetría redox presente en esa especie. Se informan también las propiedades luminiscentes y electroquímicas de nuevos complejos simétricos y asimétricos de carbonilos de Re y arenos de Ru puenteados por 4,4'-bipiridina.

I 40

## INTERACCIONES DE INTERCAMBIO EN LOS COMPLEJOS DE COBRE(II) CON LOS DIPÉPTIDOS L-LEUCIL-L-TIROSINA Y L-TIROSIL-L-LEUCINA TRANSMITIDAS A TRAVÉS DE PUENTES DE H

Nieves M. C. Casado<sup>1</sup> y Rafael Calvo<sup>1,2</sup>

1. Departamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias. Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, C.C. 242, 3000 Santa Fe, Argentina.

2. INTEC-CONICET, Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina

E-mail: [ncasado@dfbioq.unl.edu.ar](mailto:ncasado@dfbioq.unl.edu.ar)

Los compuestos de Cu(II) con los dipéptidos L-leucil-L-tirosina y L-tirosil-L-leucina cristalizan en el grupo espacial  $P2_12_1$  con cadenas de iones Cu(II) unidos por puentes carboxilato paralelas a uno de los ejes cristalinos.<sup>a,b</sup> Cobres en cadenas vecinas están conectados por puentes químicos largos con una longitud de 19 Å idénticos para ambos complejos, formados por los grupos laterales de los aminoácidos unidos por un puente de hidrógeno fuerte del tipo "puente de hidrógeno asistido por resonancia". En este trabajo utilizamos la técnica de resonancia paramagnética electrónica (RPE) en muestras monocristalinas de esos complejos para estudiar las interacciones de intercambio entre iones Cu(II) en cadenas vecinas transmitidas por esos puentes largos. Los espectros de RPE muestran resonancias colapsadas y no completamente colapsadas dependiendo de la orientación del campo magnético respecto de los ejes cristalinos. Medimos la dependencia angular de las posiciones y los anchos de los espectros y a partir de esos resultados evaluamos los acoplamientos entre iones cobre vecinos en cadenas adyacentes. Los valores obtenidos,  $|J/k|$  0.008(3) K para Cu(II)Leu-Tyr y 0.0076(1) K para Cu(II)Tyr-Leu son muy similares y se discuten en términos de las características de los puentes de H.

Trabajo subvencionado por UNL, CONICET y Fundación Antorchas.

I 41

**SÍNTESIS A BAJA TEMPERATURA DE CARBUROS  
COMPLEJOS DE MOLIBDENO**

Silvia Alejandra ALCONCHEL

**Química General. Departamento de Química. Facultad de Ing. Química.  
Universidad Nacional del Litoral.  
Santiago del Estero 2829. (3000) Santa Fe.  
E-mail: salco@fiquis.unl.edu.ar**

Diversos métodos se han desarrollado para la síntesis de carburos de metales de transición con elevada superficie específica. Uno de los más ampliamente utilizados consiste en la reacción a temperatura programada (TPRe) entre un óxido precursor y una mezcla gaseosa compuesta por hidrocarburos livianos e hidrógeno. Se sabe que el uso de un oxinitruro o nitruro complejo como precursor puede conducir a la formación topotáctica de nuevos materiales. En el presente trabajo se detalla la secuencia de reacción de nitruros intersticiales de molibdeno ( $\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{N}$ ,  $\text{Co}_3\text{Mo}_3\text{N}$  y  $\text{Ni}_3\text{Mo}_3\text{N}$ ) en presencia de  $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{Ar}$ , utilizando la técnica de reacción a temperatura programada (TPRe). Los precursores nitruros se prepararon por amonólisis de molibdatos metálicos obtenidos por precipitación. Las experiencias TPRe se llevaron a cabo en un analizador de temperatura programada equipado con un detector de conductividad térmica, hasta una temperatura máxima de 1223 K. El proceso de reducción-carburización se interrumpió a diferentes temperaturas y los sólidos resultantes se caracterizaron por difracción de rayos X, análisis elemental y análisis termogravimétrico. Se aislaron de esta forma carburos isoestructurales a los nitruros de partida, dando evidencia de una reacción topotáctica. La estructura del precursor actuó como un modelo para la síntesis de estas fases, que hasta el presente no se pudieron obtener por carburización directa de molibdatos divalentes. La composición química y estabilidad de los compuestos en atmósfera reductora y oxidante resultaron dependientes de las condiciones de síntesis y del metal de la primera serie de transición.

I 42

ORAL

**INCORPORACIÓN DE ORO EN MATRICES DE  $\text{TiO}_2$   
MESOESTRUCTURADO**

M. Dolores Pérez<sup>1</sup>, Mauricio Calvo<sup>1</sup>, Sara A. Bilmes<sup>1</sup>,  
Galo Soler Illia<sup>2</sup>, Clément Sanchez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>DQIAyQF-INQUIMAE-FCEyN, UBA, Ciudad Universitaria, Pab. II, C1428EHA Buenos Aires

<sup>2</sup>Chimie de la Matière Condensée; Université Paris VI; 4, Pl. Jussieu 75252 Paris

E-mail: [dolo@qi.fcen.uba.ar](mailto:dolo@qi.fcen.uba.ar)

El diseño de materiales para miniaturización de dispositivos electrónicos implica el desarrollo de estrategias de síntesis de materiales compuestos con control de nanojunturas entre los componentes. Un aspecto particularmente relevante es la obtención de matrices compuestas metal/semiconductor con propiedades eléctricas y fotoeléctricas definidas y reproducibles.

En este trabajo se presenta un método de incorporación de Au en los poros de films de  $\text{TiO}_2$  mesoestructurados. Los films se prepararon sobre ITO, por dip-coating a partir de un sol obtenido por hidrólisis de  $\text{TiCl}_4$  en etanol, conteniendo F127 ( $\text{EO}_{106}\text{PO}_{70}\text{EO}_{106}$ ,  $\text{EO} = -(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}-)$ ). La respuesta electroquímica, el difractograma de RX (DRX) y la imagen de AFM de films tratados  $360^\circ\text{C}$  corresponde a un semiconductor mesoestructurado. La incorporación de oro en estas matrices se realiza por reducción de  $\text{AuCl}_4$   $5 \cdot 10^{-4}$  M (pH=3) a potencial controlado.

La respuesta espectroelectroquímica del material compuesto en el electrolito soporte ( $\text{NaClO}_4$  0,1M pH=3) indica la presencia de nanopartículas de oro en el interior de la matriz de  $\text{TiO}_2$  sólo en los casos en que los poros del material de partida presentan conexiones en 3 dimensiones. La persistencia de esta estructura tras la incorporación de oro se verificó por DRX, TEM y AFM.

**I 43  
ORAL**

**SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y MODIFICACIÓN SUPERFICIAL DE FILMS MESOPOROSOS DE TiO<sub>2</sub>.**

**Paula C. Angelomé<sup>1,2</sup>, Mauricio Calvo<sup>1</sup>, M. Claudia Marchi<sup>1</sup>, Sara A. Bilmes<sup>1</sup>, Galo Soler Illia,<sup>2,3</sup> Miguel A. Blesa,<sup>2</sup> David Grosso,<sup>3</sup> Eduardo Crepaldi<sup>3</sup> y Clément Sanchez<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> INQUIMAE-DQIAQF, FCEyN-UBA, Ciudad Universitaria pab. II; 1428 Buenos Aires

<sup>2</sup> Unidad de Actividad Química, CNEA, CAC, San Martín, Pcia de Bs.As.

<sup>3</sup> Chimie de la Matière Condensée; Université Paris VI; 4, Pl. Jussieu 75252 Paris  
pangelome@qi.fcen.uba.ar

El concepto de moldes supramoleculares (surfactantes o copolímeros) abrió una nueva vía de síntesis en la nanoescala, permitiendo sintetizar materiales (SiO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>...), con poros y paredes "a medida". La diversidad de usos de estos materiales (sensores, adsorbentes selectivos, encapsulamiento de moléculas...) generalmente se basa en la especificidad y selectividad de los poros, que pueden controlarse incorporando en los mismos grupos funcionales adecuados.

En este trabajo, se presenta la síntesis de películas delgadas (*e*=300 nm) de TiO<sub>2</sub> mesoestructurado a partir de la hidrólisis de TiCl<sub>4</sub>/Ti(OEt)<sub>4</sub> en etanol, empleando moldes no-iónicos: F127 (EO<sub>106</sub>PO<sub>70</sub>EO<sub>106</sub>, EO = -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)-, PO = -(CH<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>)O)-) o Brij58 ((EO)<sub>10</sub>C<sub>16</sub>H<sub>33</sub>). En ambos casos, se obtienen estructuras de poro cúbicas (*Im3m*). Se evaluaron las condiciones de tratamiento térmico y de remoción del surfactante que optimizan la mesoestructura y cristalinidad de las paredes, encontrándose mejores resultados con F127. Para la obtención de cavidades organizadas con diferente polaridad se realizó una post-funcionalización con di-hexadecil fosfato (DHP), fenilfosfonato (PP), o cisteína (Cis). La incorporación y estructura del funcionalizante dentro del poro fue monitoreada por FTIR; la polaridad de las paredes del poro se evaluó por la emisión de fluorescencia de sondas fotofísicas (pireno, eritrosina B).

**I 44  
ORAL**

**SÍNTESIS DE MATERIALES NANOESTRUCTURADOS Y ÓXIDOS MESOPORO-SOS POR AUTOENSAMBLADO INDUCIDO POR EVAPORACIÓN (AEIE).**

**Galo Soler Illia,<sup>1,2</sup> Eduardo L. Crepaldi,<sup>2</sup> David Grosso,<sup>2</sup> y Clément Sanchez<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Unidad de Actividad Química, CNEA, CAC, San Martín, Pcia de Bs.As.

<sup>2</sup> Chimie de la Matière Condensée; Université Paris VI; 4, Pl. Jussieu 75252 Paris  
galo@ccr.jussieu.fr

La síntesis "a medida" de óxidos meso- o nanotexturados provee nuevos materiales promisorios en catálisis, sensores o separación. Combinando la síntesis *sol-gel* con moldeado (*templating*) supramolecular, se obtienen materiales novedosos, presentando arreglos periódicos de cavidades altamente controladas.

En este trabajo, presentamos la síntesis de geles, films delgados y micropartículas mesoestructurados, a partir del método de AEIE (autoensamblado inducido por evaporación). Es posible obtener materiales con superestructura vermicular (*L*<sub>3</sub>), 2D-hexagonal (*p6m*) o cúbica (*Im3m*) a partir de moldes poliméricos (copolímeros en bloque), variando las condiciones de síntesis (solventes, pH, condiciones externas). Además, es posible dirigir la síntesis hacia una u otra superestructura, variando el procesamiento post-síntesis. Una caracterización precisa por DRX y SAXS in situ permite revelar los procesos que llevan al orden. Para describir las interacciones a nivel molecular, se recurre a la espectroscopia (UV/Vis, FTIR, RMN y MAS-RMN).

Estas estrategias químicas permiten obtener polvos, films y geles mesoestructurados de SiO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, y algunos óxidos mixtos (SiO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>/CeO<sub>2-x</sub>,...) de manera controlada y reproducible. Las tendencias observadas permiten racionalizar el comportamiento de estos sistemas: es posible controlar la superestructura final modulando las interacciones en la interfase polímero/mineral.

I 45

## REACCIONES DE PORFIRINAS FERRICAS CON DONORES DE NITROXILO

**Sara E. Bari, Marcelo Martí y Fabio Doctorovich**  
**INQUIMAE-DQIAyQF, FCEyN, UBA**  
**Ciudad Universitaria, Pab. II (C1428EHA)**  
**bari@qi.fcen.uba.ar**

El óxido nítrico (NO) es considerado uno de los productos finales de la reacción catalizada por la enzima óxido nítrico sintasa (NOS). Su reactividad bioquímica está asociada a la interacción con átomos de hierro hemínico de hemoproteínas, de manera análoga a la interacción con el oxígeno.

Recientemente se ha postulado que el anión nitroxilo (NO<sup>-</sup>) podría ser otro producto de la reacción catalizada por la NOS, por lo que ha crecido el interés en la revisión de sus propiedades químicas, fisicoquímicas y en el estudio de su función bioquímica. En forma alternativa, se ha demostrado que el nitroxilo también puede generarse *in vivo* por la descomposición de S-nitrosotioles, de peroxinitritos o por la reducción del NO catalizada por citocromo C.

En nuestro laboratorio estudiamos la reacción de hemina IX y (TPPSFe)Na<sub>3</sub>·12H<sub>2</sub>O con donores de nitroxilo conocidos (trioxodinitrato de sodio, ácido benzenosulfohidroxámico) en condiciones compatibles con el medio biológico. La evolución de la reacción se siguió, en todos los casos, por espectroscopia UV-visible. La posición de los máximos de los productos obtenidos coincidió con la de los derivados nitrosilados de porfirinas ferrosas, que se obtienen por reacción con hidroxilamina o por nitrosilación reductiva.

Las reacciones de donores de nitroxilo con porfirinas férricas constituyen un nuevo método de obtención de nitrosilporfirinas ferrosas y propone la revisión de los mecanismos de acción de hemoproteínas frente a las distintas formas redox del NO.

I 46

## PREPARACIÓN DE DOBLES PEROVSKITAS POR VIA HÚMEDA

**Silvia E. JACOBO**

**Departamento de Química, Facultad de Ingeniería, UBA, Paseo Colón 850, (1063) Buenos Aires**  
**e-mail: sjacobo@fi.uba.ar**

Las dobles perovskitas de composición Me<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> (Me:Ca-Sr-Ba) son compuestos ferromagnéticos, semi-metálicos que presentan magnitorresistencia colosal y una temperatura de Curie suficientemente alta (340-400K). El método usual de síntesis es el método cerámico a partir de MeCO<sub>3</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y MoO<sub>3</sub> calcinados a 1200°C por uno o dos días en corriente de H<sub>2</sub>/Ar (2/98%) con moliendas intermedias entre los ciclos.

En este trabajo se presenta la preparación de Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> por vía húmeda por medio de la descomposición térmica de los oxalatos. Se sintetizó acetato de hierro(II) por el método de Wickam modificado a partir de la disolución de hierro metálico en acético glacial en atmósfera inerte. Se introdujeron los otros elementos y se agregó ácido oxálico para formar el precursor orgánico. La precipitación se favoreció mediante el agregado de acetona.

El precursor se trató térmicamente en atmósfera de nitrógeno a diferentes temperaturas con el fin de explorar la evolución del mismo hacia la formación de la fase buscada y/o la aparición de fases intermedias.

La descomposición del precursor se analizó también mediante TG y DTA.

El método propuesto tiene algunas ventajas como son: evitar el uso de H<sub>2</sub> como reductor durante la calcinación por introducir el hierro como Fe(II), reducir la temperatura y el tiempo de calcinación del material, obtención de partículas de menor tamaño.

I 47

**SINTESIS, ESTUDIO ESTRUCTURAL ESPECTROSCOPICO Y TERMICO DE  $[\text{Nd}(\text{H}_2\text{O})_2]_2 (\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_4)_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$**

E.V. Brusau<sup>1</sup>, J.C. Pedregosa<sup>1</sup>, G.E. Narda<sup>1</sup>, G. Echeverria<sup>2,3</sup>, G. Punte<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Química Inorgánica, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia- Universidad Nacional de San Luis-Chacabuco y Pedernera –5700-San Luis, Argentina.

E-mail: gnarda@unsl.edu.ar

<sup>2</sup> LANADI-IFLP, Facultad de Ciencias Exactas- Universidad Nacional de La Plata- 47 y 115 –1900- La Plata- Argentina.

<sup>3</sup> Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de La Plata- 1 y 47 –1900- La Plata- Argentina

E-mail: gnarda@unsl.edu.ar

El  $[\text{Nd}(\text{H}_2\text{O})_2]_2 (\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_4)_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  cristaliza como una red tridimensional en el sistema triclinico, grupo espacial P-1. El estudio estructural muestra que Nd presenta una coordinación 9 adoptando una estructura polimérica. Se identifican en la estructura cadenas infinitas de puentes Nd-O-Nd alternados con Nd-O-C-O-Nd en la dirección del eje *a*. Las moléculas de H<sub>2</sub>O de la estructura están involucradas en interacciones puente H lo que permite justificar la transformación de fase observada a 64°C.

Se reporta una completa asignación de los espectros FTIR- Raman la cual es consistente con los datos estructurales obtenidos.

A través del análisis térmico realizado por TG y ATD se observa que la descomposición térmica procede formando un intermediario amorfo el cual descompone produciendo Nd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> hexagonal como producto final.

I 48  
ORAL

**SINTESIS, ESTRUCTURA Y ESPECTROS FTIR DE COMPLEJOS METALICOS DE Zn(II), Cu(II) Y Co(II) CON 2-AMINO-5-BENCILMERCAPTO-1,3,4-TIADIAZOL**

G. E. Camí, J. C. Pedregosa, M. Liu González <sup>(1)</sup>, F. Sanz Ruiz <sup>(1)</sup>

Area de Química General e Inorgánica “Dr. Gabino F. Puelles, Departamento de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera, 5700-San Luis.

<sup>(1)</sup> S.C.S.I.E. Sección de R-X-monocristal y Dpto. de Termodinámica, Fac. de Física, Universidad de Valencia, Av. Dr. Moliner 50, Burjasot, 46100 Valencia, España.

jpereg@unsl.edu.ar

Nuevos complejos metálicos monoméricos del tioéter: 2-amino-5-bencilmercapto-1,3,4-tiadiazol ( $\text{C}_9\text{H}_9\text{N}_3\text{S}_2$ ) con Cu(II), Co(II) y Zn(II) fueron sintetizados. Monocristales de estas fases fueron estudiados por difracción de Rx y muestras policristalinas por espectroscopia FTIR a temperatura ambiente. Los datos cristalográficos para estas fases triclinicas son:  $[\text{Co}(\text{C}_9\text{H}_9\text{N}_3\text{S}_2)_2\text{Cl}_2]$ :  $a = 9.713(4) \text{ \AA}$ ,  $b = 10.013(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 12.3703(13) \text{ \AA}$ ;  $\alpha = 89.073(13)^\circ$ ,  $\beta = 85.298(17)^\circ$ ,  $\gamma = 89.53(2)^\circ$ ;  $[\text{Zn}(\text{C}_9\text{H}_9\text{N}_3\text{S}_2)_2\text{Cl}_2]$ :  $a = 9.648(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 10.0626(16) \text{ \AA}$ ,  $c = 12.365(2) \text{ \AA}$ ;  $\alpha = 89.078(19)^\circ$ ,  $\beta = 85.693(18)^\circ$ ,  $\gamma = 81.637(14)^\circ$  y  $[\text{Cu}(\text{C}_9\text{H}_9\text{N}_3\text{S}_2)_2\text{Cl}]_2\text{Cl}$ :  $a = 11.5510(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 12.3490(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 17.1140(5) \text{ \AA}$ ;  $\alpha = 108.3500(10)^\circ$ ,  $\beta = 92.7360(10)^\circ$ ,  $\gamma = 97.3580(15)^\circ$ . Co(II) y Zn(II) presentan entorno tetraédrico con dos tioéteres monodentados (cada uno coordinando por un N<sub>(tiadiazólico)</sub>) y dos átomos de cloro, mientras que Cu(II) posee cuatro tioéteres monodentados (cada uno coordinando por un N<sub>(tiadiazólico)</sub>) y un cloro apical con geometría piramidal cuadrada distorsionada. La red está constituida por unidades monoméricas discretas que proveen estabilidad cristalina a través de uniones puente hidrógeno y los datos espectroscópicos son consistentes con este modelo estructural.

I 49

**SINTESIS, COMPORTAMIENTO VIBRACIONAL TERMICO DE  $Nd_2(C_4H_4O_4)_3 \cdot 4H_2O$  y  $Eu_2(C_4H_4O_4)_3 \cdot 5H_2O$**

**D. A. Curvale, M.C. Bernini, E.V. Brusau, G.E. Narda**  
**Química Inorgánica, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera 5700- San Luis.**  
**E-mail: gnarda@unsl.edu.ar**

Dentro del estudio general de estructuras cristalinas, comportamiento espectroscópico y térmico de dicarboxilatos metálicos de lantánidos (malonatos, succinatos, glutaratos, adipatos) se obtuvieron dos nuevos succinatos hidratados de Nd(III) y Eu(III):  $Nd_2(C_4H_4O_4)_3 \cdot 4H_2O$  y  $Eu_2(C_4H_4O_4)_3 \cdot 5H_2O$ . Los diagramas de difracción de Rx realizados sobre muestras microcristalinas permitieron determinar que ambas fases son isoestructurales.

Los espectros FTIR muestran los desplazamientos esperados para los estiramientos C-O en estos sistemas que permite inferir sobre el tipo de unión en los grupos carboxilatos. La asignación de las bandas asociadas a  $H_2O$  se realiza en comparación con los espectros de muestras parcial y totalmente deshidratadas.

Los diagramas TG / ATD muestran un mecanismo de deshidratación en dos etapas para ambos compuestos, debido al diferente compromiso estructural de las moléculas de agua en la red cristalina. A temperaturas superiores se observa la descomposición de la fase anhidra en varias etapas obteniéndose finalmente los respectivos óxidos metálicos  $Nd_2O_3$  y  $Eu_2O_3$ . Este comportamiento es comparado con el de otros dicarboxilatos hidratados estudiados previamente en nuestro laboratorio para los cuales existen datos estructurales determinados a partir de monocristales.

I 50  
ORAL

**COMPORTAMIENTO ESTRUCTURAL Y MAGNETICO DE LA PEROVSKITA DOBLE  $Sr(Fe_{2/3}Mo_{1/3})O_3$  EN FUNCION DE LA TEMPERATURA.**

**M.del C. Viola<sup>(1)</sup>, J.C. Pedregosa<sup>(1)</sup>, R.E. Carbonio<sup>(2)</sup>, M.J. Martínez López<sup>(3)</sup>  
 J.A. Alonso<sup>(3)</sup>**

<sup>(1)</sup>Area de Química General e Inorgánica "Dr. Gabino F. Puelles", Departamento de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera, 5700-San Luis.

<sup>(2)</sup>Departamento de Físico-Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, Córdoba.

<sup>(3)</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, C.S.I.C., Cantoblanco, Madrid, España  
[ipedreg@unsl.edu.ar](mailto:ipedreg@unsl.edu.ar)

El descubrimiento de magnetorresistencia colosal en la perovskita doble  $Sr(Fe_{1/2}Mo_{1/2})O_3$  ha incrementado el interés de físicos y químicos del estado sólido dado su aplicación tecnológica. Recientemente hemos estudiado fases similares de la misma estequiometría  $Sr(B''_{1/2}B'_{1/2})O_3$  con  $B'' = Co$ ,  $B' = Mo$ ,  $W$ , que presentan interesantes cambios estructurales y magnéticos con la temperatura.  $Sr(Co_{1/2}Mo_{1/2})O_3$  presentó también magnetorresistencia colosal.

En este trabajo se sintetiza  $Sr(Fe_{2/3}Mo_{1/3})O_3$ , por el método de precursor con citrato y calcinación hasta 1150° C. El estudio estructural se realizó por medio del Análisis Rietveld a partir de datos de NPD. En esta fase tetragonal, 14/m, ordenada, con  $a = 5,5599 \text{ \AA}$   $c = 7,8493 \text{ \AA}$  a temperatura ambiente se observa una sistemática contracción de la red al ser enfriada hasta 2 K con  $a = 5,5404 \text{ \AA}$   $c = 7,8379 \text{ \AA}$ . También se observan cambios en el comportamiento magnético.

I 51

**PEROVSKITAS DOBLES  $\text{Ca}(\text{B}'_{2/3}\text{B}''_{1/3})\text{O}_3$  CON  $\text{B}' = \text{Co}, \text{Fe}$  y  $\text{B}'' = \text{Mo}, \text{W}, \text{Te}, \text{U}$ . SINTESIS Y REFINAMIENTO DE LAS ESTRUCTURAS POR ANALISIS RIETVELD**

M.del C. Viola, M.S. Augsburger, R.M. Pinacca, J.C. Pedregosa, R.E. Carbonio<sup>(1)</sup>

Area de Química General e Inorgánica "Dr. Gabino F. Puelles",

Departamento de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera, 5700-San Luis.

<sup>(1)</sup> Departamento de Físico-Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, Córdoba.

[jpereg@unsl.edu.ar](mailto:jpereg@unsl.edu.ar)

En estudios recientes hemos sintetizado y refinado las estructuras cristalinas de fases tipo perovskitas dobles con estequiometrías  $\text{Sr}(\text{B}'_{2/3}\text{B}''_{1/3})\text{O}_3$  y  $\text{Sr}(\text{B}'_{1/2}\text{B}''_{1/2})\text{O}_3$  con  $\text{B}' = \text{Co}, \text{Fe}$  y  $\text{B}'' = \text{Mo}, \text{W}, \text{Te}, \text{U}$ . Estas fases resultaron tetragonales y algunas de ellas en atmósfera reductora, como  $\text{Sr}(\text{Co}_{1/2}\text{Mo}_{1/2})\text{O}_3$ , presentaron magnetorresistencia gigante. Por otra parte también aparecen interesantes cambios estructurales y magnéticos con la temperatura.

En este trabajo se sintetizan los compuestos de calcio  $\text{Ca}(\text{B}'_{2/3}\text{B}''_{1/3})\text{O}_3$ , homólogos a los anteriores, por métodos de precursor con citrato y cerámico por reacción en fase sólida hasta una temperatura máxima de 1150° C. El estudio estructural se realizó por medio del Análisis Rietveld a partir de datos de DRX de polvo. Estas fases presentan estructura de perovskitas distorsionadas ortorrómbicas y monoclinicas. Se calcularon los parámetros de la celda unitaria y la ocupación  $\text{B}'$  y  $\text{B}''$  en los sitios de Wyckoff determinando el orden-desorden de los mismos para poder predecir sobre la posible existencia de magnetorresistencia gigante en estas fases.

## INDICE POR AUTORES

| AUTOR                 | TRABAJOS                |
|-----------------------|-------------------------|
| <b>A</b>              |                         |
| Abello María Cristina | B23, B33, B34           |
| Abuin Elsa            | A1, B51                 |
| Abuin Graciela        | E6                      |
| Acebal S. G.          | B101                    |
| Acosta F.             | G4                      |
| Alarcón Sergio        | D68, D69, D87           |
| Alassia María Eugenia | D47                     |
| Alborés Pablo         | H22, H23, I28, I29, I30 |
| Alcaraz A. N.         | A5                      |
| Alcober Carlos        | B79                     |
| Alconchel Silvia      | G31, I41                |
| Alessi Adriana        | G29                     |
| Alimenti Graciela     | B31, H7, H28, H29       |
| Allan NL              | F25                     |
| Almaleck SH           | H10                     |
| Almandoz MC           | A64                     |
| Almassio M            | F32, F33                |
| Alonso JA             | I50                     |
| Alvarez Andrea        | D92, D93                |
| Alvarez Fabiola J     | I21                     |
| Alvarez Julia Jorge   | E16                     |
| Alvarez M Graciela    | D111                    |
| Alvarez Mariana       | B61, C54, G21           |
| Alvarez NB            | E11                     |
| Alvarez Patricia      | D56                     |
| Alvarez RMS           | C40                     |
| Amalvy J. I.          | B111                    |
| Amalvy JI             | E11                     |
| Amat-Guerri Francisco | A38                     |
| Ambrosio K.           | B53                     |
| Amengual Simón        | I35                     |
| Amid JA               | E19                     |
| Amorebieta Valentín   | I5                      |
| Amusátegui L          | E1                      |
| Andrada Matías        | G12                     |
| Andrade E. M.         | B87, D2, D32            |
| Andrade Tacca CA      | D67                     |
| Andreasen G.          | B14, B37, B106          |
| Andrés Gabriel        | A7                      |
| Andreu I              | C30                     |
| Andreu V              | G21                     |
| Andujar Sebastián     | A65                     |
| Angelomé Paula        | I43                     |
| Antelo Juan           | B90                     |

|                       |                                  |
|-----------------------|----------------------------------|
| Antonel PS            | D32                              |
| Apella Maria Cristina | I35                              |
| Appignanesi GA        | E5, E12                          |
| Appleby AJ            | D108                             |
| Aramendía P           | A10, A28, A63,A51                |
| Arancibia E.          | B114, B115, E17, E19             |
| Arce Florencio        | B90,G22                          |
| Arce Silvia           | G35                              |
| Ardissonne Daniel     | B34                              |
| Areco M.M.            | H16                              |
| Arévalo Alejandro     | D16                              |
| Argüello Gerardo A    | A8, A9,A54                       |
| Arguello Gustavo      | A13,A27                          |
| Arrighi CF            | D57                              |
| Arrua C               | D23                              |
| Arrua Luis A          | B33, B34, C60                    |
| Arva EA               | D19                              |
| Arvia AJ              | D65, D66, D70, D103              |
| Asurmendi JH          | E11                              |
| Augsburger MS         | I51                              |
| Autino Juan C.        | C32, C45                         |
| Avena Marcelo         | B3, B90, B113, G2, G22           |
| Avila Adelaida        | G1                               |
| Aymonino PJ           | I3, I15, I36                     |
| Azcárate Laura        | A4, A5,A9                        |
| Azcárate ML           | C5                               |
| Azcurra AI            | D36                              |
| Aznar A. C.           | B111                             |
| Aznarez S             | E19                              |
| Azzaroni O.           | B37, F29                         |
| <b>B</b>              |                                  |
| Baby RE               | I26                              |
| Bachiller Alicia      | B34                              |
| Badenes María P.      | A14                              |
| Badini R              | F28                              |
| Baggio Ricardo        | C66                              |
| Baggio Sergio         | C66                              |
| Bagnato Elizabeth     | E6                               |
| Baletka Denise        | D34                              |
| Ballarini Adriana     | B110                             |
| Ballesteros Cecilia   | B39                              |
| Baltanás M. A.        | B43, B100                        |
| Banús Ezequiel        | B70                              |
| Baraldo Luis M        | H23, I28, I29, I30, I31, I32     |
| Baran Enrique         | C23, I7, I10, I12, I13, I14, I37 |
| Barbiric D.           | C8                               |
| Barbosa Mirta         | D49, E22                         |
| Barbosa Silvia        | B28, B121, B122, B123, B124      |
| Bardavid Susana       | B115                             |
| Bari Sara             | I45                              |

|                        |                                   |
|------------------------|-----------------------------------|
| Barja Beatriz          | A10                               |
| Barrera Gustavo D      | C68, D71, F3, F11, F26            |
| Barrero Carmen R       | E16                               |
| Barselini D            | D108                              |
| Baruzzi Ana María      | D26, D35, D36, H20                |
| Basaldella Elena       | A33                               |
| Baschini M.            | B88                               |
| Batana Alicia          | F33                               |
| Batana MC              | F20                               |
| Battaglini Fernando    | D50, H5                           |
| Bazán Julio Cesar      | B31, D29, D33, F21, F22           |
| Beccaglia Ana María    | A42                               |
| Belelli P. G.          | B102                              |
| Bellavigna H           | A26                               |
| Bellino Martín G.      | B57                               |
| Bellu Sebastián        | I34                               |
| Ben Altabef A.         | C13, C20, C47, C58, C69, C70, H26 |
| Benavente A.           | C47, G26, F2                      |
| Bencayar MAR de        | F10                               |
| Benítez Elisa          | C62                               |
| Benitez G.             | B106                              |
| Bergero P. E.          | B80, B82                          |
| Berlotti Sonia         | A12, A16, A32, A45                |
| Bernik Delia           | G8, G25, G28, I20                 |
| Bernini MC             | I49                               |
| Bessone Jorge          | B92, B93, B96                     |
| Bianchi Hugo           | E23, E24                          |
| Biassutti María Alicia | A1, A43, B60, B65, B66, B74       |
| Biava Hernán           | A62                               |
| Bilmes Sara A.         | A3, B8, B21, C59, D101, I42, I43  |
| Blanco Mercedes M      | C49                               |
| Blanco Sonia           | A64, A65, H27, G35                |
| Blasco M               | F17                               |
| Blesa Miguel Angel     | B39, B98, B120, I43               |
| Bocanegra Sonia        | B24                               |
| Bocarsly AB            | D83                               |
| Bocchio Javier         | I24                               |
| Boero Rodolfo A        | A8                                |
| Boeykens S.            | B125                              |
| Bogo Horacio           | G13                               |
| Bohé Ana               | A17, I21                          |
| Bohorquez Mari         | A30                               |
| Boix A.                | B1                                |
| Bolzán AE              | D65, D66, D70                     |
| Bombasaro José         | C15, C22, C28                     |
| Bonazzola C.           | B84, D100, D101                   |
| Bonesi A               | D11, D 107, D109                  |
| Bonivardi A.           | B100                              |
| Borgnino Laura         | B113                              |
| Borsarelli Claudio     | A24, A31                          |

|                             |                   |
|-----------------------------|-------------------|
| Boscatto L.                 | B118              |
| Boscoboinik Jorge           | A66               |
| Bossi Mariano               | A28               |
| Botta Silvia                | B13               |
| Bottani Carlos              | G33, G34          |
| Bottani Eduardo             | B5, B15           |
| Bottini Susana              | E13, E21          |
| Botto I. L.                 | B35, B36          |
| Branda M. M.                | B102              |
| Brandan S.A.                | C13,C58, C70, H26 |
| Braun André M               | A46               |
| Brignole EA                 | E13, E21          |
| Brizuela G.                 | B48, B94          |
| Brondino Carlos             | C51               |
| Brunetti Verónica           | D44               |
| Bruno JAO                   | F20               |
| Bruno-Blanch Luis           | C50, C60          |
| Brusau Elena V.             | I47, I49          |
| Bruzzoni P                  | D9                |
| Bucalá Verónica             | B108              |
| Buceta N                    | C45               |
| Bucharsky E. C.             | B77               |
| Buján Elba                  | A49               |
| Bulnes F. M.                | B85               |
| Burgos Paci Maximiliano     | A9                |
| Busalmen JP                 | D106              |
| Bussetti Silvia Gonzales de | B30               |
| Bustos Marún Raúl Alberto   | C44               |
| Bustos V.                   | B116              |

### C

|                     |                                  |
|---------------------|----------------------------------|
| Caaregnato Paula    | A1, A15                          |
| Caballero Norma B.  | A15                              |
| Cabanillas ED       | I26                              |
| Cabedo N            | C30                              |
| Cabello C.          | B35, B36                         |
| Cabeza G. F.        | B105                             |
| Cabezas MD          | I26                              |
| Cabrera JL          | A27                              |
| Cabrera Ricardo     | H23                              |
| Cabrerizo Franco M  | A 44                             |
| Cáceres Jorge       | B42                              |
| Cadús Luis Eduardo  | B68, B69                         |
| Caffaratti E        | G21                              |
| Calaza Florencia    | B23                              |
| Caldentey Francisco | I35                              |
| Calderón M          | D35                              |
| Calemczuk R         | H13                              |
| Calero C            | H22                              |
| Caló O              | F14                              |
| Calvo Ernesto J.    | B50, B57, B84, D1, D62, D63, E20 |

|                        |                         |
|------------------------|-------------------------|
| Calvo Mauricio         | B8, D101, I42, I43      |
| Calvo Rafael           | I40                     |
| Camacho A              | E1                      |
| Cámara OR              | D34                     |
| Camí Gerardo           | I48                     |
| Campagnone D           | D68                     |
| Campana Sergio         | G8                      |
| Campanella Alejandrina | B43                     |
| Campanella Enrique     | E3, E9                  |
| Campderros Mercedes    | E4, E7                  |
| Canafoglia María Elena | B35                     |
| Candal Roberto J.      | B8, B67, B78, B79       |
| Canto MR               | D78                     |
| Canzonieri S           | E1, E2                  |
| Capiati N.             | B28, B122, B123, B124   |
| Capparelli Alberto     | A33, A44                |
| Capra R                | D35                     |
| Carbonio Raúl          | F12, F13, F15, I50, I51 |
| Cardinal M Fernanda    | I20                     |
| Caregnato Paula        | A2                      |
| Carlos Luciano         | A33                     |
| Carot María Lucrecia   | D59, D60                |
| Carranza RM            | D9                      |
| Carrara C.             | B20                     |
| Carrer DC              | H2                      |
| Carrera Alvaro         | G38                     |
| Carro P                | F29                     |
| Casado Nieves          | I40                     |
| Casal Alberto R        | G9, G27                 |
| Casanova Jorge         | D112, F7                |
| Cassanello Myriam      | G36                     |
| Cassano Alberto E      | A 59                    |
| Casselli Eduardo       | C9                      |
| Castellani N. J.       | B102, B105              |
| Castellano Eduardo E   | I19                     |
| Castellano EE          | F18, I36                |
| Castillo Carolina      | A16                     |
| Castillo Karina        | I23                     |
| Castillo Leandro       | C49                     |
| Castro A. A.           | B110                    |
| Castro B               | D11                     |
| Castro E. B.           | B77, B104               |
| Castro Eduardo A       | C8, C42                 |
| Castro Facundo J       | I2                      |
| Castro GT              | H27, G35                |
| Castro Luna Ana María  | B49, D37, I22           |
| Castro María Ana       | F17, F18                |
| Cattana Rosa           | C49, H 17               |
| Cattáneo C             | D96, D102               |
| Celeda A. M.           | B9                      |

|                        |                             |
|------------------------|-----------------------------|
| Celeghin Adelina G     | G6                          |
| Celej Soledad          | H25                         |
| Ceppi S                | H14                         |
| Cerdá Fernanda         | I22                         |
| Ceré Silvia Marcela    | D53                         |
| Cerecetto Hugo         | H17                         |
| Chacón Villalba ME     | I15                         |
| Chaia Z                | F18, I29                    |
| Chamorro Ester         | C62                         |
| Charlet Laurent        | G2                          |
| Chiachiera Stella M.   | B46, B118                   |
| Chialvo Abel           | D78, D82, D84, E8           |
| Chulze Sofía           | D8                          |
| Churio María Sandra    | A18                         |
| Ciacomelli Carla E     | H15                         |
| Cicerone Daniel        | E14                         |
| Cienfuegos Clarisa     | F11                         |
| Cipollone M            | D97                         |
| Ciullo L               | G21                         |
| Clavero Esteban        | C19                         |
| Cobos Carlos           | A14, C10, C11               |
| Coche Guerente Liliana | B55, D1, D73                |
| Codnia Jorge           | A4, A5, A9, C5              |
| Collet Lacoste JR      | D9                          |
| Collins Sebastián      | B100                        |
| Cometto Fernando       | B2, B29                     |
| Comini Laura           | A27                         |
| Conde Federico R       | A18                         |
| Contreras J Guillermo  | C1                          |
| Copia P.               | B46                         |
| Cordero M. C.          | B81, C67, F30               |
| Cordischi D.           | B36                         |
| Cornaglia L.           | B4, B19, B20, B47           |
| Coronado Eduardo A     | C44                         |
| Correa Mariano         | A1, A43, B60, B65, B66, B74 |
| Corso María Eugenia    | E16                         |
| Cortés D               | C30                         |
| Cortés Natalia         | A25                         |
| Corti Horacio          | E6, E10, H8, H9             |
| Cortizo AM             | H18                         |
| Cortizo María Cecilia  | H18                         |
| Costanza V             | D78                         |
| Crapiste Guillermo H.  | B91                         |
| Cremona EM             | E22                         |
| Crepaldi Eduardo       | I43, I44                    |
| Crespo Alejandro       | H1                          |
| Criado Susana          | A16, A36, A61               |
| Crivelli Irma G        | I39                         |
| Croce Adela            | A14, A15, A 21              |
| Cruz Alejandra         | I25                         |

|                          |  |
|--------------------------|--|
| Cuesta A                 | D66                                      |
| Cuffini S                | F28                                      |
| Cukiernik Fabio          | F16, F17, F18, F19                       |
| Curvale DA               | I49                                      |
| Custo Graciela           | A26                                      |
| Cutin EH                 | C40, C46                                 |
| Czarnowski Juana         | A39, A 53                                |
| <b>D</b>                 |  |
| Dabbene, V               | F28                                      |
| Daier Verónica           | A62, G20                                 |
| Dalceró A.               | B46                                      |
| Dalkaine Carlos Ventura  | D94                                      |
| Damiani Daniel E.        | B91, B108, B122                          |
| D'Angelo M. V.           | B125                                     |
| Danil de Namor Angela F  | G9, G27                                  |
| Dántola Laura            | A44                                      |
| Daraio Marta E           | G28                                      |
| Dassie Sergio            | D15, D22, D23, D25, D26, H25,<br>G32     |
| Davidowski L             | G15                                      |
| Dávila Mara              | I33                                      |
| De Gaudio Mónica         | A62                                      |
| de la Fourniere Emmanuel | B52                                      |
| De Michelis Cristian     | F30                                      |
| De Miguel Sergio         | B24, B25, B27                            |
| De Paoli Juan            | F12                                      |
| De Pauli Carlos          | B3, B113, H15                            |
| Debattista N             | A36                                      |
| Debbaudt Adriana         | H29                                      |
| del Barrio Maria Cecilia | D90                                      |
| Del Carlo, M             | D68                                      |
| del Pópulo Mario         | B10, B16, B17, B59, D17                  |
| Del Rosso P              | F31, F33                                 |
| Delgadillo Alvaro        | I39                                      |
| Della Védova C.O.        | C2, C3, C40, C45, C 56, I16, I17,<br>D16 |
| D'Eramo Fabiana          | D73, H13                                 |
| Desbrieres J             | A23                                      |
| Deshayes A.              | C14, C57, G12                            |
| Devia Angel              | I23                                      |
| Di Salvo Florencia       | E11                                      |
| Di Sarli AR              | A45, A50                                 |
| Díaz Marta S             | B28, B123, B124                          |
| Díaz Mónica              | H26                                      |
| Díaz Sonia Beatriz       | I25                                      |
| Dina Morán Juana A de    | H10, H26                                 |
| Disalvo EA               | B79, G36                                 |
| Diz Virginia             | I27                                      |
| Djurado E                | C43, I9, I23, I24, I38, I45              |
| Doctorovich Fabio        | I2                                       |
| Domanski Daniela         |  |

|                           |                              |
|---------------------------|------------------------------|
| Dominguez P               | G14                          |
| Donnio B                  | F16, F19                     |
| dos Santos Alfonso María  | A6,A53, B52, B58, B103, H16  |
| Duarte Marta              | D39, D 67, D92               |
| Duarte Roxana             | B51                          |
| Duco Walter               | A34                          |
| Duffó Gustavo             | D19, D20                     |
| Dummy P                   | H13                          |
| Dupuy Fernando            | C 69                         |
| Durantini Edgardo         | D40, D41,D42, H3, H4         |
| Dworniczak Juan C         | G37                          |
| <b>E</b>                  |                              |
| Eberhardt Andrea          | B45, B108                    |
| Echeverria Maria G        | C21, I47                     |
| Eguaras Martín            | G25                          |
| Elola María Dolores       | C18                          |
| Eloy P                    | C16                          |
| Elsner Cecilia            | E11                          |
| Emilio Carina             | A40                          |
| Encinas María V           | A12                          |
| Enriz Ricardo             | C7, C15, C27, C28, C30       |
| Erben M.F.                | C2 , C3                      |
| Errazu A.                 | B64                          |
| Escalada Juan P           | A38                          |
| Escola Natalia            | I38                          |
| Esplandiu MJ              | D59                          |
| Espósito A                | B5                           |
| Esquenoni Sylvia          | D98                          |
| Esquivel MR               | A17                          |
| Estiú G                   | C6, C50                      |
| Estrada Mario             | C12, C14, C17, C22, C43, C57 |
| Estrin D                  | C31, H1                      |
| Etchenique Roberto        | H22, H23, H24                |
| Etcheverry Susana         | I13, I18                     |
| <b>F</b>                  |                              |
| Fábregas Ismael           | B67, B78                     |
| Failla M. D.              | B72, E15                     |
| Falcone Rubén Darío       | A1, B60                      |
| Falgade Florencia         | I39                          |
| Faner Sandro A            | I1                           |
| Farina Silvia             | D20                          |
| Fasoli Héctor             | D112                         |
| Fassino L                 | B5                           |
| Faudone Sonia             | F28                          |
| Féliz Mario R             | A19, A20                     |
| Feo Mourelle Ariel        | H8, H9                       |
| Fernadnez de Mele, Mónica | H18, H19                     |
| Fernandez Albanesi Luisa  | B99                          |
| Fernandez Ariel           |                              |
| Fernández C               | F28                          |

|                         |   |
|-------------------------|---|
| Fernandez Hector        | D7, D8,   |
| Fernandez LE            | C35, C36, C38   |
| Fernandez Luciana A.    | B63, H17  |
| Fernández María B.      | B91   |
| Fernandez Prini Roberto | A63, C34, E24, G38                                      |
| Fernández RA            | D22   |
| Fernández Rafael P      | A47   |
| Fernández Silvia A      | D111  |
| Ferral Anabella         | B18, B32, D99   |
| Ferrante M              | G4  |
| Ferraris G.             | B35   |
| Ferreira María Luján    | B26, B31, B44, B45, B53, B64,<br>B122, H7,H28, H29, H30 |
| Ferreira OM             | E21   |
| Ferreiro Eladio         | B30   |
| Ferrer Evelina          | I10   |
| Ferrero Juan C          | A42, C44  |
| Ferreti Ferdinando      | A64,A66, C14, C57, C59                                  |
| Ferretti HF             | I4  |
| Ferreyra Nancy          | B55, D1   |
| Ferruggia Beatriz       | G5  |
| Fertitta E.             | B15   |
| Ferullo R. M.           | B105  |
| Fidelio GD              | H25   |
| Figueiredo F            | F5, F6  |
| Filace Julián           | B36   |
| Filippa MA              | A65   |
| Finetti M               | C48   |
| Fiol Juan J             | I35   |
| Fiol Sarah              | B90, G22  |
| Fixman Esther           | B33   |
| Flamini Daniel          | B92, B93  |
| Flores E.               | B15   |
| Florit MI               | D55   |
| Fochesatto Javier       | G10, G37  |
| Foco GM                 | E21   |
| Folquer María E         | D56, D57, D58   |
| Fontana Alicia          | G29   |
| Fontana E.              | B125  |
| Fonticelli M            | D6, D97   |
| Foresti María Laura     | B64   |
| Forzani Erica S         | D1, D63   |
| Fracchia R              | F25   |
| Franco J.               | F5, F6  |
| Franco J.I              | D112, F7  |
| Francois Nora           | G28   |
| Frank Guillermo         | E10   |
| Frascaroli María Inés   | G21   |
| Frayse JL               | D97   |
| Frechero Marisa         | E5, E12, F24, F26, F27                                  |

|                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| <b>Frontini María Alejandra</b>      | <b>D79</b>                               |
| <b>Fuentes RO</b>                    | <b>F5, F6</b>                            |
| <b>Fuertes Valeria</b>               | <b>F12, D45</b>                          |
| <b>G</b>                             |  |
| <b>Gagliardi LG</b>                  | <b>D55</b>                               |
| <b>Gaisch A.</b>                     | <b>B95</b>                               |
| <b>Gaitán Martín</b>                 | <b>I131, I32</b>                         |
| <b>Galvagno Mariano</b>              | <b>C29</b>                               |
| <b>Galvele JR</b>                    | <b>D20, D111</b>                         |
| <b>Gancheff Jorge S</b>              | <b>I22</b>                               |
| <b>Garaventta G</b>                  | <b>D109</b>                              |
| <b>Garay Fernando</b>                | <b>A1, D77, D80</b>                      |
| <b>Garay Raul</b>                    | <b>A13, F31, F32, F33</b>                |
| <b>García C</b>                      | <b>D53</b>                               |
| <b>García Elba</b>                   | <b>A33, B26, C59</b>                     |
| <b>García Garibay M</b>              | <b>A46</b>                               |
| <b>García Julia</b>                  | <b>D25</b>                               |
| <b>García Nelson</b>                 | <b>A51, D29</b>                          |
| <b>García Norman</b>                 | <b>A16, A36, A37, A38, A43, A61, A45</b> |
| <b>García P.</b>                     | <b>B88</b>                               |
| <b>García Plácido</b>                | <b>A13</b>                               |
| <b>García R</b>                      | <b>I17</b>                               |
| <b>García Raso, Angel</b>            | <b>I35</b>                               |
| <b>García Ródenas Luis</b>           | <b>B98, B120</b>                         |
| <b>García Silvana</b>                | <b>D90, D91, D92, G21</b>                |
| <b>García Silvia</b>                 | <b>G20</b>                               |
| <b>Garda Graciela</b>                | <b>B105</b>                              |
| <b>Garro Juan</b>                    | <b>C12</b>                               |
| <b>Garro Martínez Juan C</b>         | <b>G12</b>                               |
| <b>Garzía Gonzalo</b>                | <b>D64</b>                               |
| <b>Gassa Liliana</b>                 | <b>B49, D49, D57, D70, D85</b>           |
| <b>Gasull El</b>                     | <b>A66, G35</b>                          |
| <b>Gatti Carlos</b>                  | <b>G29</b>                               |
| <b>Gavernet Luciana</b>              | <b>C50</b>                               |
| <b>Gaviglio Carina</b>               | <b>I9</b>                                |
| <b>Gaviria X</b>                     | <b>D53</b>                               |
| <b>Gavotti J</b>                     | <b>D16</b>                               |
| <b>Genet M</b>                       | <b>C16</b>                               |
| <b>Gennari Fabiana C</b>             | <b>I2</b>                                |
| <b>Gennero de Chialvo María Rosa</b> | <b>D82, D84</b>                          |
| <b>Gervaldo Miguel</b>               | <b>D40, D41, D42</b>                     |
| <b>Gervasi Claudio A</b>             | <b>D56, D85</b>                          |
| <b>Gesari Susana</b>                 | <b>B126</b>                              |
| <b>Giacomelli Liliana</b>            | <b>C49, H17</b>                          |
| <b>Gianello J</b>                    | <b>A36</b>                               |
| <b>Gianotti José</b>                 | <b>A38</b>                               |
| <b>Gigola Carlos</b>                 | <b>B86, F23</b>                          |
| <b>Gil Diego M</b>                   | <b>G17</b>                               |
| <b>Gil Elisabet</b>                  | <b>G9</b>                                |
| <b>Gimenez María C</b>               | <b>B16, B80, D15</b>                     |

|                            |                             |
|----------------------------|-----------------------------|
| Giménez P                  | C69                         |
| Ginzberg B.                | B21, G4                     |
| Giombini M                 | H22, H23                    |
| Goddard R                  | I17                         |
| Goitia MT                  | G27                         |
| Gómez D                    | G11, G15                    |
| Gómez de Saravia, Sandra G | H19                         |
| Gomez Luciana              | B122                        |
| Gómez Manuel               | B23, C60                    |
| Gómez María Inés           | G26, F13, I3                |
| Gómez María Lorena         | A30                         |
| Gonzales Mercedes          | H17                         |
| González Baró Ana C        | I19                         |
| Gonzalez Evangelina        | A24                         |
| Gonzalez Gloria            | B86, F23                    |
| González Graciela A        | D31                         |
| González Inchauspe C       | D63                         |
| González JA                | G23, G24                    |
| González Juan              | G20                         |
| González Legrero MC        | C31                         |
| Gonzalez Mónica            | A2                          |
| González PJ                | C53                         |
| Gonzo Elio Emilio          | B56                         |
| Gonzo Luis F.              | B56                         |
| Gordillo Gabriel           | B57, D18, D94, E20, H10     |
| Gorriz Osvaldo             | B33                         |
| Gramajo de Doz Mónica      | G33, G 34                   |
| Grandados Alejandro M      | A7, A11                     |
| Granero Adrián M           | D3                          |
| Grange Paul                | B68, B69                    |
| Graselli María             | C9                          |
| Grau G                     | H11, H12                    |
| Grela Maria A              | A48                         |
| Groselj N                  | G15                         |
| Grosso David               | I43, I44                    |
| Grosso Viviana             | A34                         |
| Grumelli D.                | B50                         |
| Gschaider María Elena      | B31, H7, H28, H29, H30, H31 |
| Gsponer Héctor             | B38                         |
| Guardianelli Carina        | A61                         |
| Guerra López               | I16, I17                    |
| Güida Jorge Alberto        | I15, I16, I17               |
| Guillon D                  | F16, F19                    |
| Guimpel J.                 | B97                         |
| Gutierrez M.               | D95                         |
| Gutierrez Maria Isela      | A46, G1                     |
| Gutkowski Karin I          | E23                         |
| Guzmán G. A.               | B111, E11                   |
| <b>H</b>                   |                             |
| Haberkorn Néstor           | B97                         |

|                      |                              |
|----------------------|------------------------------|
| Habif Martin         | H23                          |
| Haggi, Ernesto       | A37                          |
| Hamity Mauricio      | A60                          |
| Harvey Miguel A.     | C66                          |
| Hein Lidia           | B89                          |
| Heinrich B           | F16                          |
| Hermann A            | C56                          |
| Hernández S          | F31, F33                     |
| Hernández Ubeda M    | G18                          |
| Herrera Olga S       | A50                          |
| Hocsman Ana          | G2                           |
| Hojjemberg Pablo     | A51                          |
| Hojvat R             | F25                          |
| Horowitz Gaabriel I  | A23                          |
| Horst F.             | B44                          |
| Hoyos de Rossi Rita  | A25                          |
| Huck H               | F10                          |
| Hurel E              | I34                          |
| <b>I</b>             |                              |
| Iglesias Rodrigo     | D25, D26, G32                |
| Imbihl R.            | B82                          |
| Iriarte Ana Graciela | C40                          |
| Irurzun I. M.        | B81, B82                     |
| Irusta Silvia        | B19, B20, B47                |
| Iwasita T            | D65                          |
| <b>J</b>             |                              |
| Jablonski Estanislao | B109, B110                   |
| Jacinto Julián       | I5                           |
| Jacobo Silvia        | I46                          |
| Janyistabro CV       | F22                          |
| Japas María Laura    | A51, E23                     |
| Jáuregui Esteban     | C27                          |
| Jiméneza María CL de | I36                          |
| Jíos Jorge L         | C32, C45                     |
| Jobbágy Matías       | B119                         |
| Juan A.              | B94, B126, F14               |
| Juanto S.            | B104                         |
| Juárez AV            | D5                           |
| Juárez María F       | D44                          |
| Juárez RE            | D110                         |
| Jubert Alicia        | C21, C32, C41, C48, C63, C65 |
| Juliarena Ma. Paula  | A19                          |
| Juttner K.           | B40                          |
| <b>K</b>             |                              |
| Kaim Wofgang         | I32                          |
| Karlsson A           | F28                          |
| Katusich O           | G30                          |
| Katz M.              | E18                          |
| Katz N.              | I39                          |

|                       |   |
|-----------------------|---|
| Kawde Abdel-Nasser    | D104                                      |
| Kessler Teresita      | B40, B95, D37                             |
| King DA               | C67                                       |
| Konig Patricia        | F9  |
| Kremer Carlos         | I22                                       |
| Krishnan L            | D83                                       |
| Kuperman Marcelo      | G39                                       |
| <b>L</b>              |   |
| La Morgia LF          | D57                                       |
| Labas Marisol D       | A59                                       |
| Labbé Pierre          | B55, D1, D73, H13                         |
| Lacconi Gabriela Inés | D12, D64, D88                             |
| Lagier Claudia        | D69, D87                                  |
| Lamas Diego           | D110, I26, I27                            |
| Lane Silvia           | A35, A50, B42                             |
| Lange M.              | B40                                       |
| Lanús HE              | C70                                       |
| Lapitz Patricia       | D111                                      |
| Laria Daniel          | C18, C19, C33                             |
| Lasalle Verónica      | B72                                       |
| Lascalea GE           | D110, I27                                 |
| Latini Lorena         | B61                                       |
| Lavat Araceli         | C9, I6, I7                                |
| Lazarte Dardo         | G10, G37                                  |
| Lazzeri Débora        | H3  |
| Ledesma Ana           | C13                                       |
| Legido José L         | E17                                       |
| Leite SGF             | H5  |
| Leiva Ana María       | I39                                       |
| Leiva Ezequiel        | B10, B16, B17, B59, B80, D15,<br>D17, F15 |
| Lema Ricardo          | A60                                       |
| Lempel A              | E20                                       |
| Leon P.G.             | B77                                       |
| Lescano Gabriela M    | F21                                       |
| Leung Tong            | D50                                       |
| Levin Gustavo         | C49                                       |
| Levina A              | I34                                       |
| Levrantiev M Yu       | F25                                       |
| Levy P                | F9  |
| Leyva Ana Graciela    | B13, F9, F10                              |
| Lezna Reynaldo O      | A20                                       |
| Linarez Perez Omar E. | D45, D48                                  |
| Lissi Eduardo         | B51                                       |
| Litter Marta          | A26, A40, A48, B13                        |
| Liu González M        | I48                                       |
| Lizarraga Leonardo    | D2  |
| Llanos J              | B15                                       |
| Lobasso Karina        | B67                                       |
| Lobayan RM            | C63                                       |

|                          |   |
|--------------------------|---|
| Loeb Bárbara             | I39                                       |
| Lombardi B               | C16                                       |
| Lombardich Juan Pablo    | F14                                       |
| Lombardo Eduardo         | B1, B19, B20, B41, B47                    |
| Longinotti María Paula   | E10                                       |
| López B                  | H11, H12                                  |
| Lopez Damián Alejandro   | D10                                       |
| López de Mishima Beatriz | D46, D95, D96, D102                       |
| López Eduardo            | B108                                      |
| López J. J.              | C47, C70                                  |
| López María Beatriz      | B22, C24                                  |
| López Pasquali CE        | G18                                       |
| López Rocío              | B90                                       |
| Lopez Teijelo Manuel     | D12, D44, D45, D46, D47, D48,<br>H20, H24 |
| López Tévez Leonor       | C41                                       |
| Lorente C.               | A44                                       |
| Lorenzo V                | F9  |
| Lovino Magalí            | I20                                       |
| Luco Juan M              | C52, D43                                  |
| Luiz Marta               | A45                                       |
| Luque Noelia             | D17                                       |
| <b>M</b>                 |   |
| Macagno Vicente A.       | B2, B18, B29, B32, D59, D60, D99          |
| Madariaga Sandra T       | C1  |
| Maffi Maria C S de       | D33                                       |
| Magallanes Jorge         | A40 G15, G16                              |
| Maggio B                 | H2  |
| Magnoli C.               | B46                                       |
| Maguna FP                | C42                                       |
| Mahmud Zulema A          | D94                                       |
| Manca Silvia Graciela    | I37                                       |
| Mandagarán Beatriz       | E3, E9                                    |
| Mandarà JF               | D39                                       |
| Manzanares Cuello MI     | D34                                       |
| Manzano FA               | A4, A9, H26                               |
| Manzi P                  | G21                                       |
| Marceca E                | C31, C34, G38                             |
| Marchi M Claudia         | I43                                       |
| Marchi M.Claudia         | A3, B21                                   |
| Marchiando César         | D40                                       |
| Marchiando Nancy         | D7  |
| Marchiano Susana L       | D103                                      |
| Marcipar A               | D69, D87                                  |
| Marcipar I               | D69, D87                                  |
| Marconi Mario            | E10                                       |
| Mariano A                | E2  |
| Marioli JM               | D38                                       |
| Marozzi Carlos Alberto   | D78, D83                                  |
| Marques F                | F5, F6                                    |

|                                 |   |
|---------------------------------|---|
| <b>Marrero Julieta</b>          | <b>G16</b>                              |
| <b>Marshall Guillermo</b>       | <b>D31</b>                              |
| <b>Martell L</b>                | <b>H13</b>                              |
| <b>Marti, Marcelo</b>           | <b>H1, I45</b>                          |
| <b>Martin Carlos A</b>          | <b>A59</b>                              |
| <b>Martín Gago JA</b>           | <b>B14</b>                              |
| <b>Martínez López MJ</b>        | <b>I50</b>                              |
| <b>Martínez V</b>               | <b>G21</b>                              |
| <b>Martinez Miguel A</b>        | <b>I36</b>                              |
| <b>Martins ME</b>               | <b>D97</b>                              |
| <b>Mártire Daniel</b>           | <b>A2</b>                               |
| <b>Masman Marcelo</b>           | <b>C28</b>                              |
| <b>Massa Néstor E</b>           | <b>C21 , C32</b>                        |
| <b>Massad Walter</b>            | <b>A8</b>                               |
| <b>Matienzo Rocío</b>           | <b>B79</b>                              |
| <b>Mato Marta M</b>             | <b>E17</b>                              |
| <b>Mayer, Carlos</b>            | <b>D39, D02</b>                         |
| <b>Mazzieri Maria Rosa</b>      | <b>C68</b>                              |
| <b>Mazzobre Florencia</b>       | <b>H8, H9</b>                           |
| <b>Medina Córdoba Lucrecia</b>  | <b>I3</b>                               |
| <b>Mele Mónica Fernandez de</b> |   |
| <b>Mellace María G</b>          | <b>I39</b>                              |
| <b>Mendez de Leo Lucila</b>     | <b>E24</b>                              |
| <b>Méndez Eduardo</b>           | <b>I22</b>                              |
| <b>Mercadante Adriana Z</b>     | <b>A31</b>                              |
| <b>Merino Nora</b>              | <b>B68, B69</b>                         |
| <b>Messina Paula</b>            | <b>B7</b>                               |
| <b>Mignone R</b>                | <b>D96</b>                              |
| <b>Milanesio M.Elisa</b>        | <b>A29, D40, D41, D42</b>               |
| <b>Milano Julián</b>            | <b>B99</b>                              |
| <b>Milt Viviana</b>             | <b>B70, B71</b>                         |
| <b>Minaberry Y</b>              | <b>D18</b>                              |
| <b>Minelli G.</b>               | <b>B36</b>                              |
| <b>Miró Eduardo E.</b>          | <b>A23, B1, B71, B117</b>               |
| <b>Miscoria Silvia A.</b>       | <b>D71</b>                              |
| <b>Miscoski Saandra</b>         | <b>A36, A38, A45</b>                    |
| <b>Mishima H.</b>               | <b>D95, D96, D102</b>                   |
| <b>Mizrahi Daniela</b>          | <b>G7</b>                               |
| <b>Mola E. E.</b>               | <b>B81, B82, C67, F30</b>               |
| <b>Molina Fernando Victor</b>   | <b>B87, D2, D31, D32</b>                |
| <b>Molina G</b>                 | <b>I34</b>                              |
| <b>Molina José Ramón</b>        | <b>C48</b>                              |
| <b>Molina MAA</b>               | <b>F20</b>                              |
| <b>Molina Patricia</b>          | <b>A61, D8</b>                          |
| <b>Molinari Francisco</b>       | <b>G26, I3</b>                          |
| <b>Molinuevo María S</b>        | <b>I18</b>                              |
| <b>Monard MC</b>                | <b>F20</b>                              |
| <b>Monge María Eugenia</b>      | <b>G25</b>                              |
| <b>Montanin RA</b>              | <b>E5, E12, F24, F26, F27, F32, F33</b> |
| <b>Montaña María Paulina</b>    | <b>A36, H21</b>                         |

|                        |                       |
|------------------------|-----------------------|
| Montejano Hernán       | A30, A32              |
| Montenegro Mariana     | A31                   |
| Montero ME             | G27                   |
| Monzón Lorena          | D113                  |
| Mora María Fernanda    | D88                   |
| Mora Valdéz M.I.       | C46                   |
| Morán Eduardo          | B32, D60              |
| Morán FE               | D99, D102             |
| Morán, Juana A de      | G17, I3               |
| Morando Pedro          | B98, B120             |
| Moreno C               | E2                    |
| Moreno Diego           | A62                   |
| Moriena Gustavo        | C31, G38              |
| Morini Marcela         | B7, B54               |
| Moro L.                | B48, F14              |
| Morris W               | D19                   |
| Moyano Fernando        | B60, B74              |
| Múnera John            | B47                   |
| Muñoz Andrés           | B96                   |
| Mussari L              | E1                    |
| <b>N</b>               |                       |
| Nadal V.               | B87                   |
| Nájera J.J.            | B42                   |
| Narambuena Claudio     | B10                   |
| Narda Griselda E.      | I4, I47, I49          |
| Nart Francisco Carlos  | D100                  |
| Navarro A              | C20                   |
| Navarro María Carolina | F13                   |
| Nazareno Mónica A      | A24, A31              |
| Nazareno N             | D95                   |
| Negri Martín           | B79, G7, G8, G25, G36 |
| Nerli Bibiana          | G5                    |
| Nieto Jorge D          | A50                   |
| Novaira Mercedes       | B60                   |
| Nudelman N             | G30                   |
| Núñez MB               | C42                   |
| Núñez SC               | A27                   |
| <b>O</b>               |                       |
| Oberhammer H           | C46                   |
| Oberholzer J           | D85                   |
| Occhiuzzi M.           | B36                   |
| Odetti Héctor          | B5                    |
| Okulik Nora            | C41, C42, C65         |
| Olabe José A.          | A57, A55, H6          |
| Olcese Luis            | G19                   |
| Olea Luis F            | G17                   |
| Oliveros Esther        | A46                   |
| Olleta Adriana C       | A50                   |
| Orellana Guillermo     | A46                   |
| Orozco M               | E2                    |

|                            |  |
|----------------------------|--|
| Orsetti S.                 | B87  |
| Ortiga J                   | I8   |
| Ortiz Patricia             | A26, D27                                     |
| Ortiz Ricardi A            | I8   |
| Otero Lidia                | G10  |
| Otero Luis                 | D40, D41, D42                                |
| Ottavianelli E             | C48  |
| Oviedo C                   | D44, F10                                     |
| <b>P</b>                   |  |
| Pacioni Natalia            | A56, A58                                     |
| Pagani D                   | D69, D87                                     |
| Pagola S                   | F2, F13                                      |
| Pajares Adriana            | A38  |
| Palazzi V                  | G14  |
| Palleschi G                | D68  |
| Palopoli Claudia           | A62  |
| Pannuncio Miner E.         | B73, F13                                     |
| Pantano Diego              | C33,   |
| Pappano N                  | A36, H21                                     |
| Parajón Costa Beatriz      | I14  |
| Pardini O. R.              | B111, E11                                    |
| Paredes Olivera Patricia   | B2, B18, B29, B73                            |
| Parejka Viñaveya Ana Laura | G31  |
| Parise Alejandro           | I5   |
| Parisi F                   | F9   |
| Partal F                   | C47  |
| Pasquale Miguel A          | D103   |
| Pasquevich Daniel          | A17, I21                                     |
| Pastor Elena               | D64  |
| Patrito E. Martín          | B2, B18, B29, B32, B73, D59, D60,<br>D99, H2 |
| Pavioni O.                 | B95  |
| Paz Andrade MI             | E17  |
| Paz V                      | H14  |
| Pazmiño Andrea             | G37  |
| Pedano María Laura         | D86, H13                                     |
| Pedregosa José C.          | I47, I48, I50, I51                           |
| Pedroni Viviana            | H7, H28, H29, H31                            |
| Pedroni Viviana            | B45  |
| Perec M                    | A10  |
| Peretti H                  | D107   |
| Pereyra Valeria Michel     | I25  |
| Perez C. A.                | B4   |
| Pérez Diego R              | I11  |
| Perez Manuel A.            | D45, D47, D48, H20, H24                      |
| Perez María Dolores        | B8, I20, I42                                 |
| Perez Padilla Antonio      | E4, E7                                       |
| Perillo Isabel A           | C49  |
| Perissinotti Laura         | C43,   |
| Perna P                    | D63  |

|                            |                         |
|----------------------------|-------------------------|
| Peruchena N                | C7, C62, C63, C65       |
| Pessagno Romina            | B103                    |
| Peters CJ                  | E13                     |
| Petragalli A               | G11                     |
| Petrone Julián             | I28                     |
| Petroselli Gabriela        | A44                     |
| Pettigrosso Susana         | F24                     |
| Pettinicchi S.             | D96                     |
| Peuriot A                  | C5                      |
| Pfaffen María V. Del Valle | D27                     |
| Piatti RCV                 | D66, D70                |
| Piccirilli P.              | B125                    |
| Picó Guillermo             | G5, I34                 |
| Pierini B. T.              | B41                     |
| Pieslinger Germán          | I29                     |
| Pilla, Ana Susana          | D39                     |
| Pinaca RM                  | I51                     |
| Pinto Vitorino Graciela    | C68                     |
| Piñeiro Manuel M           | E17                     |
| Pires Myriam S             | G29                     |
| Piro Oscar E               | C55, F18, I10, I19, I29 |
| Piroc Oscar E              | I36                     |
| Pis Diez R                 | C48                     |
| Polla Griselda             | G11, F9                 |
| Polsky Ronen               | D104                    |
| Ponce CA                   | C12, C22,               |
| Porcal Gaabriela           | A12                     |
| Portela Ana Laura          | D12                     |
| Porteneuve Jacques         | G37                     |
| Posadas D                  | D6, D55                 |
| Posadaz Ariana             | A43                     |
| Postigo Miguel             | E1, E2                  |
| Povse Vicente              | A57                     |
| Pratt María Rosa           | F21                     |
| Previtali Carlos           | A12, A18, A32, A52      |
| Pronsato E.                | B48, B94, B126          |
| Pugliese MA                | G27                     |
| Punte G                    | I16, I17, I47           |
| Purino M                   | A66                     |

## Q

|                   |                         |
|-------------------|-------------------------|
| Quaino Paola      | D84                     |
| Quel E.J.         | G10, G37                |
| Quincoces Claudia | B86, F23                |
| Quintero M        | F9                      |
| Quinzani Lidia M  | E15                     |
| Quinzani Oscar    | C51, C55, F26, I10, I11 |
| Quiroga A         | G21                     |

## R

|             |     |
|-------------|-----|
| Raba J      | D43 |
| Raffa Diego | D50 |

|                            |                                       |
|----------------------------|---------------------------------------|
| Raffaelli J.               | B5                                    |
| Rafti M.                   | B82                                   |
| Ramirez Pastor A. J.       | B85                                   |
| Ranea VA                   | C67                                   |
| Rapp ME                    | D110, H28, I27                        |
| Raschi AB                  | C47, F2                               |
| Real S.G.                  | B77, B104, D11, D58                   |
| Regazzoni Alberto          | B119, B120, I1                        |
| Reich S                    | G15                                   |
| Reinaudi Luis              | F15                                   |
| Remes Lenicov F.           | B107                                  |
| Rendtorff Nicolás          | B82, C67                              |
| Reta Mario                 | H17                                   |
| Reyes Luis                 | B78                                   |
| Ribotta SB                 | D57                                   |
| Rigo María Verónica        | H21                                   |
| Rinaldi Carlos A           | A42, A47                              |
| Ríos Alessandro            | A31                                   |
| Ríos Stella Maris          | G30                                   |
| Ristori Pablo              | G10                                   |
| Rivarola A                 | E7                                    |
| Rivarola Claudia           | A52                                   |
| Rivarola JB                | G23                                   |
| Rivas Gustavo              | D71, D72, D73, D75, D86, D104,<br>H13 |
| Rizzotto Marcela           | I34                                   |
| Robledo Alicia             | DC29                                  |
| Robles NL                  | C40                                   |
| Rodríguez Fris Ariel       | E15                                   |
| Rodríguez Ana María        | C7, C27                               |
| Rodríguez Daniel           | A26                                   |
| Rodríguez Diana            | B13, C53                              |
| Rodríguez Horacio          | B102, F3                              |
| Rodríguez J B              | A28                                   |
| Rodríguez Javier           | C29                                   |
| Rodríguez JL               | D64                                   |
| Rodríguez Juan             | B78, E7                               |
| Rodríguez M C              | D72, D73,                             |
| Rodríguez Mónica I         | I37                                   |
| Rodríguez MS               | H30                                   |
| Rodríguez Presa María José | D55                                   |
| Rojas Ana M                | G28                                   |
| Rojas D                    | C7,                                   |
| Rojas Delgado Ricardo      | B3                                    |
| Rojas Mariana              | B59, B80                              |
| Roldán ML                  | C70                                   |
| Roldán V                   | G21                                   |
| Román M Victoria           | H8, H9                                |
| Romanelli Gustavo P        | C32, C45                              |
| Romani L                   | E1                                    |

|                         |                                       |
|-------------------------|---------------------------------------|
| Romano E                | C47, F2                               |
| Romano R.M.             | C3, C4,                               |
| Roncaroli Federico      | H6                                    |
| Rondano Karina          | G18                                   |
| Rosasco Esteban M       | A40                                   |
| Rosenbhch M             | F10                                   |
| Rossa Maximiliano       | A47                                   |
| Rossi Melina            | I30                                   |
| Rossi Rita Hoyos de     | A7, A11                               |
| Rosso de Sanchez Susana | D10, D30, D79                         |
| Rossomando PC           | C59                                   |
| Rovetto Laura           | E13                                   |
| Rubianes María Dolores  | D75                                   |
| Rubio M                 | F28                                   |
| Rubiolo Amelia C        | G6                                    |
| Rueda Elsa              | B26, B39, B44, B53, B61, B89,<br>C54, |
| Rueda Mónica            | I8                                    |
| Ruggeri Augusto         | G32                                   |
| Ruiz Diego Mario        | D106                                  |
| Ruiz G.                 | A19, A20                              |
| Ruiz Holgado M. E. de   | B114, E17, E19                        |
| Ruiz María del Carmen   | G23, G24                              |
| Rusjan Marcia           | F16, F17, F18                         |
| Russo María Eugenia     | C21                                   |
| Rustoy EM               | C51                                   |
| <b>S</b>                |                                       |
| Saggio M                | F14                                   |
| Sagua Aurora            | F21                                   |
| Saidman Silvana         | B92, B93, D13, D14                    |
| Saitúa H                | E4                                    |
| Sala Luis               | G20, G21                              |
| Salas JA                | E18                                   |
| Salinas Daniel          | D90, D91, D92, D93                    |
| Salvarezza R.           | B14, B37, B106, B107, D97, F29        |
| Samara Kleopatra        | I1                                    |
| San Román Enrique       | G13                                   |
| San Sebastián C         | D85                                   |
| Sánchez Clément         | I42, I43, I44                         |
| Sanchez de Pinto M.I.   | H14, G14                              |
| Sánchez Eduardo I       | G1                                    |
| Sánchez Marín J.        | C22                                   |
| Sánchez Paula           | E14                                   |
| Sánchez R.              | B49                                   |
| Sancho Matías           | A64, C59                              |
| Sanguinett A            | D112                                  |
| Sanramé C               | A51                                   |
| Santagato LN            | C15                                   |
| Santiago G              | C5                                    |
| Santiago Martín         | C9                                    |

|                     |  |
|---------------------|--|
| Santillán Marta B   | C52  |
| Santo Marisa R.     | B63, C49, H17  |
| Santoro M           | G21  |
| Sapag Karim         | I33  |
| Saraví Cisneros H   | C50  |
| Sarmiento Martin    | A27, A54   |
| Scalise Inés        | H4   |
| Scelsa O.           | B24, B25, B27, B109, B110                                      |
| Schaefer Cecilia    | B114   |
| Schalamuk I. B.     | B35  |
| Scherlis Damián     | H1   |
| Schettino M.        | B88, C45   |
| Schilardi P. L.     | B37  |
| Schmal M.           | B4   |
| Schulz Pablo Carlos | B7, B54, B115, H7, H28, H29, H31                               |
| Schulz Pablo Gastón | B86, F23   |
| Sciaini Alberto     | C34  |
| Scodelaro A.        | B96  |
| Senz Alejandro      | B38  |
| Sequeira A          | C62  |
| Sereno L.           | D16, D38, D40, D41, D42, D43                                   |
| Sereno Silvia       | D38  |
| Serra Ramiro        | B70  |
| Sicre Juan E        | C10  |
| Sieben Juan M       | F27  |
| Sieger Monika       | I23  |
| Sierra María Belén  | B54  |
| Signorella Sandra   | G20, G21   |
| Silber J. J.        | A29, B60, B63, B65, B66, B74,<br>B118, C49, D40, D41, D42, H17 |
| Sileo Elsa E        | B98, C54   |
| Silvetti P          | D102   |
| Simison SN          | D10, D106  |
| Simonetti Sandra    | B48, B94   |
| Sirena M.           | B97  |
| Slep LD             | I28, I31   |
| Slezak V.           | C5,  |
| Smichowski P        | G11, G16   |
| Socolsky Cecilia    | C58  |
| Sola Mariela        | F22  |
| Solar Cecilia       | I33  |
| Soler Illia Galo    | I42, I43, I44  |
| Sólamo Horacio      | G33, G34   |
| Solis Velia         | D1, D77, D80 H14   |
| Soltermann A.T.     | A34  |
| Sorgentini B        | H11, H12   |
| Soriaga MP          | D106   |
| Soriano Marta       | F25  |
| Sosa GL             | C63  |
| Spedaletti César A  | C17  |

|                          |          |
|--------------------------|----------|
| Spetter Carla V          | D29      |
| Srinivasan S             | D83      |
| Stephens PW              | F2       |
| Steren Laura B.          | B97, B99 |
| Stettler Guillermo       | A38      |
| Stinco C                 | G15      |
| Strumia MC               | D35      |
| Suchetti Carlos A        | A60      |
| Suescun Pereyra Leopoldo | C66      |
| Sustersic MG             | D98      |
| Suvire FD                | C15, C30 |

**T**

|                     |                       |
|---------------------|-----------------------|
| Taccone Raúl        | A35                   |
| Taira Romina        | C32                   |
| Tanco S.            | B107                  |
| Tarazaga C          | E7                    |
| Tarulli Susana H    | I10                   |
| Tasso Silvina       | C6                    |
| Taus V.             | B9                    |
| Tellería Gabriela P | C55                   |
| Temprano N.         | B125                  |
| Terrón Angel        | I35                   |
| Teruel MA           | A35                   |
| Testa J             | A48                   |
| Tevez Héctor        | B58                   |
| Thomas Andrés H     | A44                   |
| Timmermann Ernesto  | B12                   |
| Tomás Vert F        | C12, C17, C57         |
| Torres Sanchez Rosa | B9, B88, B103         |
| Torriero Angel      | D43                   |
| Toselli Beatriz     | G19                   |
| Toselli Víctor A    | F15                   |
| Tótaro Roxana M     | I35                   |
| Trapé M             | I34                   |
| Trejo L             | G14                   |
| Trezza Mónica A     | I6                    |
| Triacca Walter      | D11, D107, D108, D109 |
| Trinelli A.         | A6                    |
| Triszcz Juan        | A33                   |
| Trossero C          | I34                   |
| Trubiano Gustavo    | B64                   |
| Tucceri Maria E     | C11                   |
| Tucceri Ricardo     | D4, D6, D21           |
| Tunietti Jimena     | A61                   |
| Turjanski A         | C43                   |
| Tuttolomondo M.E.   | C20, C69              |

**U**

|               |           |
|---------------|-----------|
| Ulic S.E.     | C56       |
| Ulla María A. | B70, B117 |
| Uñac R.       | B116      |

|                           |   |
|---------------------------|---|
| Uñates Marta E            | D58                                       |
| Urretaviscaya Guillermina | I2  |
| <b>V</b>                  |   |
| Vago M                    | D62                                       |
| Valcarce MB               | D30                                       |
| Valdman D                 | H5  |
| Valdman E                 | H5, H16                                   |
| Valenti Laura             | H15                                       |
| Vallés E.M.               | B72                                       |
| van Eldik                 | H6  |
| Varadlo L                 | H22                                       |
| Varetti Eduardo           | C13, C20, C36, C38, C58, C69,<br>C70, I15 |
| Vargas D.                 | B4  |
| Vázquez C.                | B125                                      |
| Vazquez Marcela Vivian    | D30                                       |
| Vazquez Rodríguez JL      | H27                                       |
| Vega Daniel               | B99, F9                                   |
| Vega Enrique D.           | I4  |
| Vega S                    | E5, E12                                   |
| Veglia Alicia V           | A56, A58                                  |
| Vela M. E.                | B14, B106, B107, B111                     |
| Velasquez S               | G30                                       |
| Velazco M                 | G18                                       |
| Venaruzzo JL              | I8  |
| Vericat C.                | B14, B106, B107                           |
| Verón María Gisela        | C38                                       |
| Vicente J. L.             | B81, B82, C67, F30                        |
| Vico Leticia              | B101                                      |
| Videla Mariela            | A55                                       |
| Vilella J.                | B25, B27, B109                            |
| Villary M                 | F24                                       |
| Viola María del C.        | I50, I51                                  |
| Visintin A                | D11, D107, D108, D109                     |
| Volpe María Alicia        | B26, B45, B121                            |
| Volzone C                 | I8  |
| von Mengershausen AE      | D98                                       |
| <b>W</b>                  |   |
| Wagner C.C.               | I12, I14                                  |
| Walsøe de Reca, NE        | D110, I26, I27,                           |
| Weisz Ariel               | B120                                      |
| Welti Erica               | D98                                       |
| Weyhermüller T            | I28, I 31                                 |
| Wezler Diana E            | A63, A51                                  |
| Wilke Natalia             | H20                                       |
| Williams P.A.M.           | I13, I18, I19, I34                        |
| Wolcan Ezequiel           | A19, A20                                  |
| Wolfram Elian             | G10, G37                                  |
| Wolosiuk A.               | B50                                       |

**Y**

|                   |               |
|-------------------|---------------|
| Yamin Lázaro      | C60           |
| Yañez María Julia | B121          |
| Yepes D.          | B19           |
| Yppolito Romina   | A16           |
| Yudi Mabel        | D5, D36, D113 |

**Z**

|                        |               |
|------------------------|---------------|
| Zaera F.               | B116          |
| Zamarbide Graciela     | C12, C14,     |
| Zamaro Juan Manuel     | B117          |
| Zamora A               | C7            |
| Zamora Miguel          | C27, C28, C30 |
| Zanini Graciela        | G22           |
| Zayat Leonardo         | H22, H23      |
| Zelcer A               | F17, F18, F19 |
| Zemarbide GN           | C22, G12      |
| Zenobi María Cristina  | B89           |
| Zerbino J. O.          | B49           |
| Zgrablich G.           | B116          |
| Zgrablich J. A.        | B85           |
| Zingaretti Lilian      | B118          |
| Zoloff Mischoff Martín | A11           |
| Zón M.Alicia           | D3, D7, D8,   |
| Zupan J                | G15           |
| Zurita JL              | E18           |

## ADDENDUM

La siguiente información fue accidentalmente omitida en las respectivas secciones.

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| B14 | ESTUDIO IN-SITU DE LA AD-SORCIÓN DE AZUFRE Y ALCANOTIOLES SOBRE AU(111) MEDIANTE GIXD Y STM | C.Vericat, M.E.Vela, G.Andreasen, J.A.Martin-Gago y R.C.Salvarezza | poster |
|-----|---|--|--------|

|     |   |  |        |
|-----|---|--|--------|
| G40 | ELECCION DEL EXTRACTANTE APROPIADO EN LA DETERMINACIÓN DE AMONIO EN SUELO POR FIA | F. Mellano, A. Acosta, M. Velasco <sup>1</sup> y C.E. López Pasquali | Poster |
| G41 | DETERMINACIÓN DE NITRITOS Y NITRATOS POR FIA                                      | C.Antinori, K. Rondano, M Hernández Ubeda y C.E. López Pasquali      | Poster |

|             |   |
|-------------|---|
| <b>B 14</b> | <p><b>ESTUDIO IN-SITU DE LA ADSORCIÓN DE AZUFRE Y ALCANOTIOLES SOBRE AU(111) MEDIANTE GIXD Y STM</b></p> <p><b>C.Vericat, M.E.Vela, G.Andreasen, J.A.Martin-Gago<sup>1</sup> y R.C.Salvarezza</b><br/> <b>INIFTA, C.C.16, Suc.4 (1900) La Plata.</b><br/> <b>E-mail:cvericat@inifta.unlp.edu.ar</b><br/> <sup>(1)</sup>Instituto de Ciencia de los Materiales de Madrid (ICCM)</p> <p>Se estudió el comportamiento de los sistemas S/Au(111) y hexanotiol/Au(111) en soluciones acuosas de pH 13 mediante STM y difracción de rayos X en condiciones de potencial controlado y con técnicas electroquímicas convencionales.</p> <p>La intensidad integrada en condiciones anti-Bragg de un CTR (crystal truncation rod) particular se puede usar para monitorear en tiempo real la cantidad de especie adsorbida en función del potencial aplicado a la interfase. Combinando estos resultados con las imágenes STM in situ y la respuesta voltamperométrica se puede demostrar la existencia, tanto en el sistema S/Au(111) como en el hexanotiol/Au(111), de una capa fisisorbida que precede a la formación de la especie quimisorbida durante la electroadsorción y que permanece sobre el electrodo luego de electrodesorción.</p> <p>Estos estudios permiten establecer las distintas etapas que intervienen en la cinética y el mecanismo de formación y remoción de estas monocapas. Además el comportamiento similar de los sistemas S/Au y tiol/Au muestra el rol preponderante de la unión entre el azufre y el sustrato entre los factores que determinan la formación de monocapas con cabeza azufrada sobre superficies de Au(111).</p> |
|-------------|---|

G 40

**ELECCION DEL EXTRACTANTE APROPIADO EN LA DETERMINACIÓN DE AMONIO EN SUELO POR FIA**

**F. Mellano, A. Acosta, M. Velasco<sup>1</sup> y C.E. López Pasquali**

**Universidad Nacional de Santiago del Estero – FAA – Inst. de Cs. Químicas**

**Avda. Belgrano 1912 – 4200 Santiago del Estero –Argentina**

**<sup>1</sup>Universidad Nacional de Córdoba – FCA - Córdoba**

**e-mail: [fermellano@hotmail.com](mailto:fermellano@hotmail.com)**

La determinación de los nutrientes del suelo es de vital importancia para los estudios agronómicos, ya que a partir de estos, se conocen las características especiales y la disponibilidad de los mismos, dando una idea de cuales serían los cultivos mejor adaptados para cada tipo de suelo.

El amonio es una de las formas de nitrógeno soluble que encontramos en el suelo. Para su extracción se usa normalmente cloruro de potasio 1 M, cloruro de potasio 2 M y cloruro de calcio 0.01M. Sin embargo la posibilidad de aplicarlos en la determinación de amonio por un sistema de flujo continuo con detección conductimétrica, no ha sido analizada, y en particular para los suelos de Santiago del Estero.

Se han realizado las mediciones sobre quince muestras de suelo de diferentes zonas de la provincia, las que fueron preparadas para su análisis según normas vigentes. Se aplicó también el método de adición de estándares para determinar el porcentaje de extracción de cada extractante.

De los tres extractantes utilizados solo KCl 1 M y KCl 2 M resultan ser apropiados para este tipo de determinación. Se obtuvieron los mejores resultados cuando se extrajo con KCl 2 M.

G 41

**DETERMINACIÓN DE NITRITOS Y NITRATOS POR FIA**

**C. Antinori, K. Rondano, M Hernández Ubeda y C.E. López Pasquali**

**Universidad Nacional de Santiago del Estero – FAA – Inst. de Cs. Qcas**

**Avda. Belgrano 1912 – 4200 Santiago del Estero –Argentina**

**e-mail: [krondano@unse.edu.ar](mailto:krondano@unse.edu.ar)**

El nitrógeno es uno de los nutrientes principales de las plantas, constituyente orgánico de los vegetales, la falta de este elemento puede detener los procesos vitales más importantes. Las distintas formas de nitrógeno soluble que encontramos en el agua y suelo, son nitratos, nitritos, amonio y nitrógeno orgánico. Las plantas lo requieren de la solución del suelo, ya que fundamentalmente lo pueden absorber de ella, especialmente en la forma de nitratos. Sin embargo, en cualquier matrices ambientales, un exceso del mismo puede producir efectos nocivos a todos los seres vivos.

De esto surge la necesidad de cuantificar su contenido en los suelos, teniendo en cuenta la caracterización físico química de los mismos.

En este trabajo se presentan los datos obtenidos en el análisis de nitritos y nitratos en suelos de esta provincia, realizados a partir de un sistema FIA que utiliza el método modificado de Griess-Ilosvay con detección espectrofotométrica. Para la determinación de nitratos se utiliza una columna de Cd-Cu antes de producir la reacción Griess-Ilosvay, de manera que el nitrato se reduzca a nitrito.

Los resultados obtenidos hasta ahora muestran que es posible utilizar el sistema propuesto para la determinación de estos analitos en matrices ambientales.

- 1- El trabajo A 35, su título debe ser cambiado por:  
- “ Constantes de velocidad absolutas para las reacciones de O(3P) con halobutenos”.  
- Los autores correspondientes son: R.A.Taccone, P.M. Cometto, M.A.Teruel y S.I. Lane.

2 – En el Resumen del trabajo D43, los autores deben figurar de la siguiente forma:

|            |   |
|------------|---|
| <b>D43</b> | <b>DESARROLLO DE UN METODO ELECTROQUIMICO<br/>PARA LA DETERMINACION DE ACIDO SALICILICO EN<br/>FORMULACIONES FARMACEUTICAS DE ACIDO<br/>ACETILSALICILICO</b>  |
|            | <b>Torriero A. A. J.<sup>1</sup>, Luco J. M.<sup>1</sup>, Sereno L.<sup>2</sup>, Raba J.<sup>1</sup>.</b>   |
|            | <sup>1</sup> Departamento de Química Analítica. Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia.<br>Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco y Pedernera (5700) San Luis.   |
|            | <sup>2</sup> Departamento de Química y Física. Universidad Nacional de Río Cuarto. Agencia<br>postal Nro. 3. (5800)- Río Cuarto. Córdoba  |
|            | E-mail:   |
|            | <p>El ácido salicílico es una impureza común del ácido acetilsalicílico y su determinación resulta de interés en el control de calidad de formulaciones farmacéuticas que poseen al ácido acetilsalicílico como compuesto mayoritario. Si bien esta determinación puede ser realizada con un método colorimétrico, el método electroquímico compete con aquella y a veces con mayor precisión. En este trabajo se estudió el mecanismo de oxidación electroquímico del ácido salicílico y a partir de estos datos se implementó una técnica para la cuantificación del ácido salicílico que se encuentra impurificando formulaciones farmacéuticas de ácido acetilsalicílico.</p> <p>Este método es simple, sensitivo, preciso y rápido; en el cual no hay pasos de extracción ni evaporación y puede ser usado fácilmente en laboratorios de control de calidad para la determinación de ácido acetilsalicílico en muy pequeñas concentraciones.</p> |

3 – Los posters D19 y D20 se presentan en el segundo turno

4 – Los posters A37 y A38 se presentan en el primer turno.