



XX REUNIÓN ANUAL DE LA AACr

5 al 7 de noviembre

XIII Taller de la Asociación Argentina de Cristalografía
7 de noviembre

Compilador/a

Eduardo Gutierrez y Yamina Dávila.



San Luis 2025



Universidad
Nacional
de San Luis

neu
NUEVA EDITORIAL
UNIVERSITARIA

**XX Reunión Anual
de la Asociación Argentina
de Cristalografía.
San Luis 2025**

Compiladores

**Eduardo Gutierrez
Yamina Dávila**



Universidad
Nacional
de San Luis

Libro de resúmenes de la XX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía. San Luis 2025 / Eduardo Gutierrez... [et al.]; Compilación de Eduardo Gutierrez; Yamina Dávila. - 1a ed. - San Luis: Nueva Editorial Universitaria - UNSL, 2026. Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online
ISBN 978-987-733-492-0

1. Cristalografía. I. Gutierrez, Eduardo II. Gutierrez, Eduardo, comp. III. Dávila, Yamina, comp.
CDD 548

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS

Rector: Dr. Raúl Andrés GIL

Vicerrectora: Mgtr. María Claudia BRUSASCA

Secretario de Imagen y Comunicación Institucional: Téc. Ramiro Gabriel REZZANO KLEMENT

Nueva Editorial Universitaria

Avda. Ejército de los Andes 950 Edificio Rectorado - 2º piso - Pasillo A.
D5700HHW Tel. (+54) 0266-4520300 int. 5197
www.neu.unsl.edu.ar / unslneu@gmail.com

Coordinación General:

Lic. Mariano Daniel PEREZ

Dpto. Administrativo:

Tec. Silvia GARRO

Dpto. Edición:

Tec. Enrique SILVAGE

Lic. Cecilia RODONI

Diseño del logo de la reunión:

Vanesa Ponce.

Las fotos utilizadas en el diseño de tapa han sido extraídas de los trabajos presentados en este libro de resúmenes por: L.D. Matilla, M.N. Fuentes y V. G. Franco.



Impreso en Argentina - Printed in Argentina
ISBN 978-987-733-492-0

Queda hecho el depósito que marca la ley 11.723.

Prohibida la reproducción total o parcial de este material sin permiso expreso de NEU

© 2026 Nueva Editorial Universitaria

Libro de resúmenes



XX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía
5 al 7 de noviembre de 2025 - San Luis



XIII Taller de la Asociación Argentina de Cristalografía
Sesión especial 7 de noviembre de 2025 - San Luis



XVI Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía
XXX de noviembre de 2025 - La Punta



Las opiniones expresadas en este libro corresponden exclusivamente a los autores de los trabajos y no reflejan necesariamente el punto de vista de los editores. La información podrá ser reproducida siempre que se cite la fuente.

Declaración de Política de Libertad Científica

El Comité Organizador de la XX Reunión Anual, el XIII Taller y la XVI Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía reafirma su compromiso con la política de no discriminación.

Se garantiza el derecho y la libertad de los científicos a participar en actividades científicas internacionales, sin distinción de origen étnico, religión, nacionalidad, idioma, postura política, género, sexo o edad, en concordancia con los Estatutos del Consejo Internacional de Ciencia. En esta Reunión y en sus eventos satélite, no habrá barreras que limiten la libre participación de científicos de buena fe.

<https://www.iucr.org/iucr/governance/advisory-committees/gedc/>

Auspiciantes:



Patrocinadores:



La Asociación Argentina de Cristalografía (AACr) se dedica a promover y difundir la Cristalografía en el país y a nuclear a los grupos que trabajan en esta área del conocimiento y/o la usan como herramienta en sus investigaciones. Las temáticas que se discuten son amplias, como lo hace la Unión Internacional de Cristalografía (International Union of Crystallography - IUCr, www.iucr.org). La AACr fue fundada el 30 de octubre de 2004, en ocasión del “Taller Nacional de Cristalografía” realizado en Villa Giardino, Provincia de Córdoba.

Carta de Bienvenida

Estimados colegas:

En nombre del Comité Organizador, es un inmenso placer darles la más cordial bienvenida a nuestra XX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía (AACr), con la esperanza de mantener nuestro principal espacio de intercambio de saberes y experiencias vinculadas a la Cristalografía y sus múltiples aplicaciones.

Luego de haber cumplido 20 años como asociación, durante el 2024, la presente reunión tiene una connotación especial al ser nuestro vigésimo encuentro. Este aspecto nos invita a repasar el camino recorrido desde aquel primer desafío en Villa Giardino en 2004 donde un grupo de cristalógrafos con una enorme visión federal fundaron la Asociación Argentina de Cristalografía. A lo largo de estos veinte encuentros destacamos algunos hitos principales como la realización de la primera Escuela Anual de la AACr (2009), el primer Taller de la AACr (2012), el primer Concurso Nacional de Crecimiento de Cristales (2014) y desde el año pasado la entrega del premio “Dra Graciela Punte” a la mejor tesis doctoral en el campo de la cristalografía. Esta trayectoria realizada con mucho entusiasmo y esfuerzo por la comunidad de la AACr, nos consolidada como una comunidad federal, interdisciplinaria y vibrante que trabaja incansablemente por los objetivos de la AACr.

Es un honor para la comunidad de San Luis recibirlos en esta vigésima reunión desde el 5 al 7 de noviembre incluyendo una jornada especial para el XIII Taller de la AACr titulado “Cristalografía y Sector Productivo” con más de 100 presentaciones que incluyen conferencias plenarias, semiplenarias, contribuciones orales y posters. Luego, desde el 8 al 12 de noviembre se realizará adelante XVI Escuela de la Asociación que tratará sobre “Crecimiento de Cristales y Métodos de Resolución Estructural”.

Además, deseamos expresar nuestro más profundo agradecimiento a las instituciones y empresas que permitieron la realización de este evento gracias a su auspicio y apoyo financiero: Universiada Nacional de San Luis (sede central del evento), Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Facultad de Ciencias Físico, Matemática y Naturales, CONICET (CCT-San Luis), Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (UNSL-CONICET), International Union of Crystallography (IUCr), Asociación Física Argentina, Fundación José A. Balseiro, Universidad de la Punta, CCDC, ICDD, Analytical, INBOX, Microlat, Bioendesa, Cementos Avellaneda y SRK consulting.

Asimismo, extendemos nuestro agradecimiento a cada uno de ustedes: estudiantes de grado y posgrado, becarios, investigadores y personal de apoyo, por el esfuerzo de estar aquí y por sostener, con su trabajo diario, a esta gran comunidad cristalográfica.

Los invitamos a disfrutar de estas jornadas, a celebrar este vigésimo encuentro.

¡Bienvenidos a la reunión anual de la AACr 2025!

Comité Organizador



**ASOCIACIÓN ARGENTINA
DE CRISTALOGRAFÍA**

**Comisión
Directiva**

Presidente: Dr. Carlos A. López

Vicepresidente: Dr. Martín E. Saleta

Secretaria: Dra. María C. Bernini

Pro-secretaria: Dra. Clarisa E. Alvarez

Tesorero: Dr. Germán E. Gómez

Pro-tesorero: Dr. Pablo M. Botta

**Vocales titulares: Dra. Valeria C. Fuertes
Lic. Susana Conconi
Dra. Dina Tobía
Dr. Félix M. Ferroni**

Vocal suplente: Dra. Ana L. Larralde



Comité Organizador

Carlos López
Celeste Bernini
Germán Gómez
Elena Brusau
Yamina Dávila
Arturo Gómez
Lucía Barbosa
Eduardo L. Gutiérrez
Oriana Barrios Torres
Antares Martínez
Diego Lizarraga
Vanesa Ponce
Rosmaira Martínez
Sofía Piguillem
Francisco Lavarra
Natalia Sarmiento
Colaboradores
Oswaldo Rosas Rivas
Lupe Alaniz Cornejo
Oriana Seel

Comité Científico

Griselda Narda (Chair)
Carlos López
Daniel Vega
Sebastián Klinke
Clarisa E. Álvarez
Susana Conconi
Pablo Botta

Desarrollo de Página Web

Ángel Rodríguez

Índice general

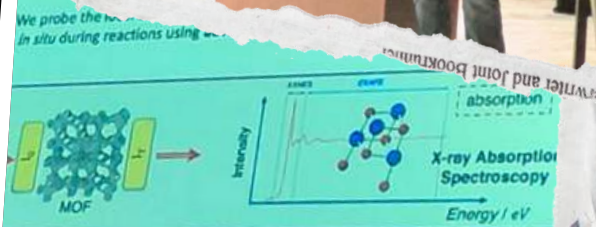
Cronograma	9
Conferencias Plenarias	10
Conferencias Semiplenarias	18
Comunicaciones Orales	27
Comunicaciones Murales	37
Taller	106
Semiplenarias del Taller	107
Contribuciones Orales	111
Índice de Autores	119

Cronograma

Horario	Miércoles 5/11	Jueves 6/11	Viernes 7/11	
08:00-08:30	Acreditación		Acreditación	XIII Taller de la AACr
08:30-09:00	Apertura		Apertura	
09:00-09:30	P 1: J. M. Zamaro		P 3: P. Alzari	
09:30-10:00		CI 2: A. Godoy		
10:00-10:30	SP 1: M. Rafti	SP 6: L. Llarrull		
10:30-11:00	Café			
11:00-11:30	SP 2: M.C. Bernini	SP 7: J. Gonzalez	CO T1-T2	
11:30-12:00	CE 1: Microlat	CE 2: Analytical	CE 3: INBOX	
12:00-12:30	CO 1-4	CO 7-9	CO T3-T4	
12:30-13:00		Premio “Graciela Punte”	Mesa Redonda	
13:00-13:30	Almuerzo			
13:30-14:00				
14:00-14:30				
14:30-15:00	P 2: Diego Lanas	SP 8: D. Comedi	CO T3-T4	
15:00-15:30		Acto Honoris Causa P 4: Adriana Serquis	CI 3: Di Salvo	
15:30-16:00	P 6: M.E. Zelaya			
16:00-16:30				
16:30-17:00	Café			
17:00-17:30	SP 5: M. Saleta	P 5: Bertrand Toudic	P 7: J. Hupp	
17:30-18:00	CO 5-6			
18:00-18:30	Sesión de posters	Sesión de posters	Clausura	
18:30-19:00				
19:00-19:30	Cocktail de Bienvenida	Asamblea de Socios de la AACr		
19:30-20:00				
20:00-20:30				
20:30		Cena de Camaradería		

P: Pleanaria; SP: Semiplenaria; CE: Conferencia empresarial; CO: Comunicaciones Orales; CI: Conferencia Invitada.

Conferencias Plenarias





INVESTIGACIÓN DE PELÍCULAS CATALÍTICAS BASADAS EN SÓLIDOS CRISTALINOS: EMPLEO DE HERRAMIENTAS DE CRISTALOGRAFÍA

J. M. Zamaro

Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE, UNL-CONICET), Santa Fe, Argentina.
zamaro@fiq.unl.edu.ar

Palabras claves: CATÁLISIS; PELÍCULAS; CATALIZADORES ESTRUCTURADOS; SÓLIDOS CRISTALINOS

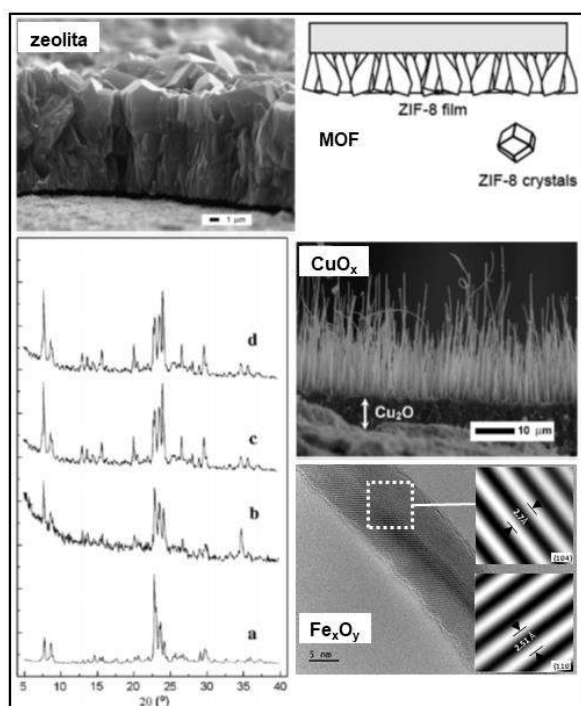


Figura 1. Películas cristalinas de diversos materiales, empleadas en catálisis ([1-3]).

El estudio de catalizadores sólidos en forma de película es una ciencia en sí misma dentro del gran área de catálisis. El desarrollo de materiales con este tipo de configuración es de singular importancia ya que permite, en muchos casos, alcanzar un desempeño superior al de catalizadores tradicionales en formato de partículas. Algunas de las características que hacen posible esto son, por ejemplo, simplificar su aplicabilidad y recupero del sistema de reacción, incrementar la eficiencia y/o estabilidad del sólido, modificar las propiedades respecto a los análogos en polvo o permitir integrar el catalizador en dispositivos que intensifiquen el proceso. No obstante, cada etapa del procedimiento de preparación de las películas y la correlación de las propiedades obtenidas con su desempeño, está atravesada por una constante y profunda caracterización fisicoquímica. Con ello, se puede analizar el impacto de variables preparativas y controlar, al menos parcialmente, las características fisicoquímicas finales tales como microestructura o composición, que en definitiva determinan su desempeño catalítico. Tal secuencia de investigación es intrínsecamente interdisciplinaria ya que confluyen conocimientos de química, materiales, fisicoquímica y cristalografía, entre otros. En el caso particular de películas catalíticas basadas en materiales cristalinos, la ciencia de cristalografía adquiere un rol protagónico. La utilización de herramientas de dicha disciplina en combinación con otras técnicas instrumentales de caracterización, han permitido extraer información sobre procesos de crecimiento de películas cristalinas, sus propiedades y comportamiento catalítico [1-3]. Esto es de relevancia en el ámbito de la catálisis, dado que contribuye al desarrollo de nuevos sistemas catalíticos con un mejor desempeño.

[1] J.M. Zamaro, M.A. Ulla, E.E. Miro, Micropor. Mesopor. Mat. 115 (2008) 113–122.

[2] R.L. Papporello, E.E. Miró, J.M. Zamaro, Micropor. Mesopor. Mat. 211 (2015) 64–72.

[3] C.A. Neyertz, A.D. Gallo, M.A. Ulla, J.M. Zamaro, Surf. Coat. Tech. 285 (2016) 262–269.



LAS NUEVAS FUENTES DE LUZ SINCROTRÓN: UN FUTURO BRILLANTE PARA LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA

D.G. Lamas

Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), CONICET-Universidad Nacional de San Martín, Escuela de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. dlamas@unsam.edu.ar

Palabras claves: LUZ SINCROTRÓN; SINCROTRONES DE CUARTA GENERACIÓN; SINCROTRÓN SIRIUS; LNLS-CNPEN

La Cristalografía de rayos X logró avances y descubrimientos notables durante sus primeros 60 años gracias a los tubos de rayos X convencionales, incluyendo por ejemplo la resolución de la estructura del ADN o de moléculas fundamentales para la salud humana, como la insulina o la penicilina. Sin embargo, en los años '70, algunos investigadores empezaron a invadir los aceleradores de partículas para aprovechar una radiación especial muy intensa que se genera cuando partículas cargadas se aceleran a altísimas velocidades: la luz sincrotrón. Poco, después, en los años '80, se empezaron a construir fuentes especialmente diseñadas para experimentos con luz sincrotrón: almacenando electrones en aceleradores de forma poligonal, casi circular, en condiciones de ultra alto vacío y a velocidades próximas a la velocidad de la luz, es posible generar esta radiación muy intensa con ondas electromagnéticas que van desde el infrarrojo hasta los rayos X duros. En estos sincrotrones, llamados de 2da generación, la radiación se produce en los tramos curvos del anillo de almacenamiento de electrones. En la siguiente década comenzó una tercera etapa, con un aumento de intensidad notable, gracias al empleo de dispositivos de inserción con arreglos periódicos de imanes que se ubican en los tramos rectos del anillo de almacenamiento para forzar que los electrones oscilen. Estas fuentes avanzadas permitieron grandes avances de la Cristalografía, especialmente en relación a la estructura de macromoléculas y, por ejemplo, jugaron un papel muy importante en la lucha contra el virus COVID19.

En los últimos años, se han desarrollado nuevos sincrotrones de grandes dimensiones, del tamaño de un estadio de fútbol, y con altísimo brillo y coherencia espacial, que están permitiendo experimentos sumamente avanzados en todo tipo de sistemas. En esta conferencia, veremos las características de estos nuevos sincrotrones, conocidos como “de 4ta generación”, como es el caso del sincrotrón Sirius del Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón del Centro Nacional de Pesquisa en Energía y Materiales (LNLS-CNPEN) que se encuentra en Campinas, Brasil, y comentaremos algunas de sus aplicaciones en campos tan variados como salud humana, energías limpias, patrimonio cultural, etc. Recorreremos virtualmente sus instalaciones y nos detendremos en algunas de las estaciones experimentales (o “líneas de luz”) que ya están disponibles para usuarios de todo el mundo, donde se están haciendo experimentos muy avanzados y se han desarrollado técnicas muy novedosas. También visitaremos virtualmente otros sincrotrones en Francia, Suecia, Italia, etc.



Figura 1. El sincrotrón brasileño Sirius, en el Centro Nacional de Pesquisa en Energía y Materiales (CNPEN, Campinas, Brasil), uno de los más avanzados del mundo.



**XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr**
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



**A PERSONAL JOURNEY INTO PROTEIN CRYSTALLOGRAPHY:
FROM THE PHASE PROBLEM TO MECHANISTIC BIOLOGY**

P.M. Alzari

*Institut Pasteur, CNRS UMR 3528, Université Paris Cité, Unité de Microbiologie Structurale, Paris, France
pedro.alzari@pasteur.fr*

Keywords: PROTEIN CRYSTALLOGRAPHY; MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS; BACTERIAL CELL DIVISION; STRUCTURE-FUNCTION RELATIONSHIP

Since the foundational work of pioneering British crystallographers in the 1930s, major advances over the past four decades in theory (phasing and direct methods), technology (recombinant DNA, advanced X-ray sources, and detectors), and computation (ever faster computers and improved software) have converted protein crystallography into one of the most powerful tools in structural biology. These innovations have provided groundbreaking insights into biomolecular structures and their functions. Today, structural biology is undergoing another profound (and until not long ago largely unforeseen) transformation, shaped by the rapid emergence of machine learning algorithms – often misleadingly referred to as artificial intelligence – and the advent of high-resolution cryo-electron microscopy, which are rapidly expanding our capacity to explore biological complexity at unprecedented scales. In my presentation, I will first provide a concise historical perspective on protein crystallography and then present some results from our ongoing research in mechanistic biology to illustrate how these emerging technologies are enabling new opportunities and challenges that structural biology must confront as it adapts to a rapidly evolving scientific landscape.



**XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr**
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



LA ESTRUCTURA CRISTALINA DE MATERIALES PARA ENERGÍAS LIMPIAS: UNA CLAVE PARA ENTENDER SUS PROPIEDADES

L. Baque^{a,b}, G. Serrano^c, F. Napolitano^{a,b}, M. Melone^{a,b}, Y. Mansilla^{a,b}, J. Grassi^d, H. Saraceni^{a,b}, **A. Serquis^{a,e*}**

^aInstituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA-CONICET, Argentina. ^bDepartamento Caracterización de Materiales-GIA –CNEA, Argentina. ^cCEO & Co-Founder de Ab Astra Inc., Neuquén, Argentina. ^dFundación Centro Tecnológico Energylab, Campus Universidad de Vigo, Vigo, España. ^eSecretaría de Investigación, Creación Artística, Desarrollo y Transferencia de Tecnología – UNRN (en Licencia de a).

*aserquis@gmail.com

Palabras claves: MATERIALES PARA ENERGÍA; MATERIALES PARA CELDAS DE ÓXIDO SÓLIDO; ALEACIONES BASE CIRCONIO; SUPERCONDUCTORES BASADOS EN MgB₂

Para el desarrollo de tecnologías limpias orientadas a la transición energética es necesario mejorar la eficiencia de los sistemas asociados tanto a la generación, como al transporte y uso de la energía eléctrica. Desde hace varios años, en el grupo Caracterización de Materiales se están estudiando diversos materiales para ser utilizados en dispositivos de generación de energía limpia y sostenible como las celdas de óxido sólido (SOC, por sus siglas en inglés) en sus modos pilas de combustible o electrolizadores (SOFC o SOEC), así como aleaciones base circonio u óxidos nanométricos para aplicaciones nucleares, y superconductores que permiten una mayor eficiencia en el transporte y almacenamiento de energía eléctrica. Tanto para la comprensión de fenómenos como la oxidación de materiales como para el diseño de dispositivos de celdas de combustible, o la fabricación de cables superconductores surge la necesidad de la caracterización exhaustiva de los materiales que los componen y es fundamental la utilización y optimización de técnicas experimentales avanzadas de la cristalografía para caracterizar la relación entre la estructura cristalográfica y los defectos con las propiedades electrónicas y de transporte, y mejor aún si es posible simular condiciones de operación con el objetivo de correlacionar sus características con las propiedades de interés (propiedades de transporte, térmicas, electroquímicas, etc.)

En esta charla se propone un recorrido usando los resultados de las diferentes tesis doctorales dirigidas o codirigidas [1-7] en las temáticas mencionadas mostrando algunos ejemplos de sistemas en los que se puede ver la correlación entre los aspectos micro/nanoestructurales (determinados por los parámetros de procesamiento) y las propiedades físicas que determinan la eficiencia de los materiales estudiados.

Finalmente se propone analizar las políticas de investigación que pueden llevar estos proyectos de investigación a posibles transferencias al sector productivo.

[1] L. Baqué, “Preparación y Caracterización de Cátodos de Alto Rendimiento para Celdas de Combustible de Óxido Sólido de Temperatura Intermedia” (2011). Directora: A. Serquis. Co-director: A. Caneiro.

[2] G. Serrano, “Fabricación y caracterización de nuevos materiales superconductores basados en MgB₂” (2018). Directora: A. Serquis. Co-director: L. Cívale.

[3] F. Napolitano, “Caracterización estructural y electrónica de titanatos de lantano estroncio dopados con cobalto para su uso como electrodo de celdas combustible simétricas” (2014). Directora: A. Serquis. Co-director: D. Lamas

[4] M. Melone, “Estudio de la influencia del proceso de conformado en las propiedades de cables superconductores de Ti/Mg(B1-xCx)2” (2023). Directora: A. Serquis. Co-directora: M.T. Malachevsky.

[5] Y. Mansilla, “Estudio de films delgados de base circonia para aplicaciones en energía” (2023). Directora: A. Serquis. Co-director: M. Arce

[6] J. Grassi, “Estudio de correlaciones en aspectos estructurales y propiedades electroquímicas de transporte en óxidos con aplicaciones energéticas” (Doctorado en Química de la Facultad de Química Universidad de la República, Uruguay) (2022). Director: L. Suescum. Co-directora: A. Serquis

[7] H. Saraceni, “Estudio de la formación de capas de óxido de circonio en aleaciones base circonio” (Plan de trabajo aprobado en la carrera de Doctorado en Física del Instituto Balseiro – UNCuyo) (2019). Director: J. Santisteban. Co-directora: A. Serquis.

Agradecimiento a: L. Mogni, H. Troiani, M. Arce, M. Malachevsky, L. Suescum, D. Lamas.



A BRIEF HISTORY OF APERIODIC CRYSTALS

B. Toudic

Institute of Physics Rennes, UMR CNRS 6251, University of Rennes, France
bertrand.toudic@univ-rennes.fr

In 1944, in his book “What is life?”, Erwin Schrödinger [1] built a bridge between physicists, chemists and biologists. There, he writes: “*There seem to be two different ways of building up larger and larger associations. One is the comparatively dull way of repeating the same structure in three directions again and again... The other way is that of building up a more and more extended aggregate without the dull device of repetition... We might quite properly call that an aperiodic crystal or solid and express our hypothesis by saying: We believe a gene - or perhaps the whole chromosome fibre – to be an aperiodic solid.*”

The 1962 laureates of the Nobel Prize in Physiology or Medicine, James Watson and Francis Crick, recognized the influence of this book when they submitted to Nature [2] their famous article “Molecular Structure of Nucleic Acids”.

Since 1992, the new definition of the crystal given by the International Union of Crystallography includes the aperiodic crystals, solids which present long range order without translational symmetry. The definition is no more in the real space but in the reciprocal space solely: a material is a crystal if it has **essentially** a sharp diffraction pattern [3].

Aperiodic crystals are described within higher dimensional spaces where they recover the lost translational symmetry. The physical space is then a 3-dimensional cut of this higher dimensional space. There is an infinite degeneracy of the ground state (“Mexican hat” potential), at the origin of new fundamental physical properties. Aperiodic crystals are classified in three families [4], incommensurate modulated crystals, aperiodic intermodulated composites and quasicrystals. This last discovery by Dan Schechtman [5] was awarded by the Nobel Prize in Chemistry in 2011.

[1] E. Schrödinger, *What is Life?*, Cambridge University Press UK, 1944.

[2] J.D. Watson, F.H.C. Crick, Nature 171 (1953) 738.

[3] Acta Cryst. A48, 928 (1992).

[4] T. Janssen et al., *Aperiodic Crystals: from Modulated Phases to Quasicrystals*, IUCr 20, Oxford University Press, 2007.

[5] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett. 53 (1951) 1984.



ANÁLISIS DE LA TÉCNICA DE FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE PARES CON DIFRACCIÓN DE ELECTRONES

E.Zelaya

Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, Bariloche 8400, Rio Negro, Argentina, CNEA-CONICET.
eugeniazelaya@cnea.gob.ar

Palabras claves: TEM; PDF; SAD

La técnica de análisis de distribución de pares (pdf) es capaz de dar información de distancias interatómicas en escalas que van desde los angstroms hasta los nanómetros sin restringirse a la cristalinidad del material. Esta técnica está ampliamente reportada para el estudio de materiales amorfos vítreos o cristalinos empleando difracción de rayos X (usando luz sincrotrón) o neutrones [1,2]. Sin embargo, se ha reportado también la efectividad de esta técnica empleando haz de electrones en especial en el estudio de nanomateriales [3].

El objetivo de este trabajo es presentar la técnica en general y discutir primeramente las ventajas de realizar los experimentos empleando un haz de electrones. Los experimentos con microcopia electrónica de transmisión son asequibles en microscopios electrónicos de transmisión de laboratorio. No se necesitan grandes instalaciones como los haces de neutrones o luz sincrotrón (en el caso de rayos X). Por otra parte, la microcopia electrónica de transmisión puede analizar volúmenes del orden manométrico lo que hace ideal esta técnica para materiales nano estructurados y también materiales con orden de corto y mediano alcance. El avance de la adquisición de datos (cámaras ccd y cmos) ha permitido ver más literatura de pdf con difracción de electrones [4,5].

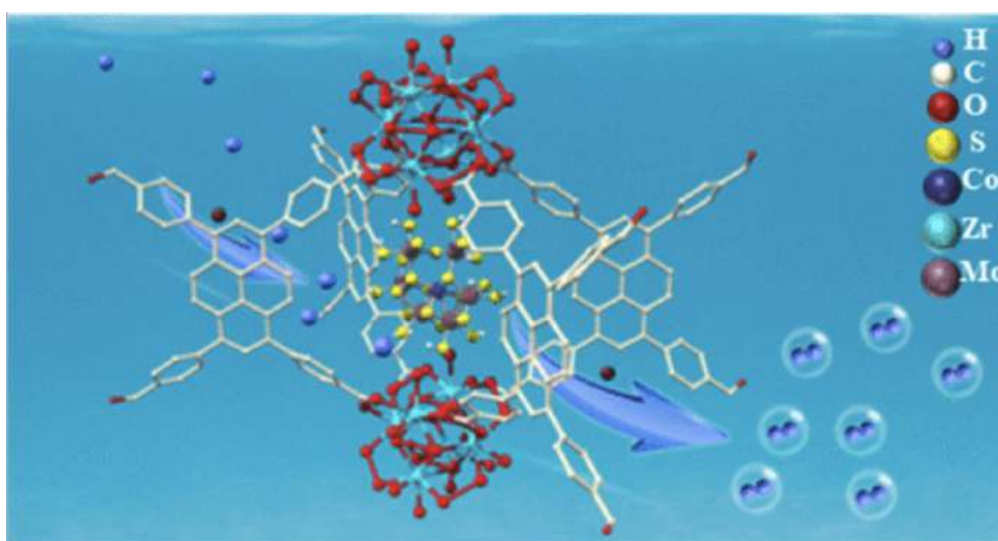
Finalmente se contarán algunos ejemplos concretos que permitirán entender el alcance y versatilidad de la técnica para un sinnúmero de materiales y algunos problemas técnicos que puedan presentarse tanto en la adquisición de datos como en su procesamiento.

- [1] K. Page, M.W. Stoltzfus, Y. Kim, T. Proffen, P.M. Woodward, A.K. Cheetham R. Seshadri, Chem. Mater. 19(16) (2007) 4037–4042.
- [2] S.J.L. Billinge, Phil.Trans. R. Soc. A 377 (2019) 20180413.
- [3] J.B. Souza Junior, G. Ravanhani Schleder, J. Bettini, I. Costa Nogueira, A. Fazzio, E.R. Leite, Matter, 4 (2021) 441–460.
- [4] X. Mu, A. Mazilkin, C. Sprau, A. Colsmann, C. Kübel, Microscopy 68 (2019) 301–309.
- [5] A. Hirata, P. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A. Reza Yavari, T. Sakurai, M. Chen, Nature Materials, 10 (2011) 28–33.

**METAL-ORGANIC FRAMEWORK (MOF) SUPPORTED ARRAYS OF CLUSTERS OF
ATOMICALLY PRECISE COMPOSITION FOR HETEROGENEOUS CATALYSIS****Joseph T. Hupp**

Northwestern University, Evanston, IL U.S.A
j-hupp@northwestern.edu

Heterogeneous catalysts play an outsized role in driving chemistry that, in turn, drives much of the global economy. An under-realized goal in heterogeneous catalysis is to achieve, routinely, the same degree of understanding of active-site structure and composition as typically obtained for molecular catalysts. When it can be obtained, atomic-level knowledge of catalyst structure, composition, and surrounding chemical environment can enormously facilitate mechanistic understanding and facilitate hypothesis-based design of superior catalysts. This lecture will illustrate how chemically and thermally robust, metal-organic frameworks (MOFs) can be exploited to obtain uniform arrays of desired heterogeneous catalysts, and how the periodicity and uniformity of catalyst@MOF assemblies can be exploited to understand activity and follow the evolution of catalysts. This lecture will touch on how desired assemblies can be made. This lecture will describe how X-ray diffraction and absorption, pair-distribution function (PDF) analysis of total X-ray diffraction, difference electron density (DED) mapping, electron microscopy, and micro electron-diffraction can be used to characterize catalysts and MOFs.



Conferencias Semiplenarias





INTEGRACIÓN DE METAL ORGANIC FRAMEWORKS EN DIVERSAS NANOARQUITECTURAS: ALGUNOS EJEMPLOS EN SENSADO Y ENERGÍA

M. Rafti

INIFTA, Departamento de Química, Fac. Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata (UNLP)
mrafti@inifta.unlp.edu.ar

Palabras claves: METAL ORGANIC FRAMEWORKS; POLÍMEROS CONDUCTORES; MATERIALES; SENSORES; ENERGÍA

En este trabajo se abordará la integración de materiales porosos originados en la combinación de centros metálicos y ligandos orgánicos conocidos como Metal Organic Frameworks (MOFs) con diferentes materiales poliméricos y óxidos porosos para la creación de nanoarquitecturas de funcionalidad específica con aplicaciones en sensado y energía. [1] Algunas de las ventajas de dichos ensamblados nanoarquitectónicos consiste en ofrecer entornos favorables para la interacción con compuestos de interés biológico confiriendo estabilidad extendida y mejora de su procesabilidad.

Se explorarán brevemente algunas estrategias sintéticas para combinar las propiedades intrínsecas de los MOFs (alta área superficial, porosidad, versatilidad funcional) con las características de los soportes poliméricos seleccionados (posibilidad de confinamiento, conductividad eléctrica, flexibilidad mecánica, procesabilidad, compatibilidad biológica). En particular se comentarán ejemplos relacionados con la posibilidad del sensado impedimétrico y regulación del transporte iónico en nanocanales por la inclusión de películas delgadas de MOFs [2,3], la posibilidad de mejorar el desempeño de reacciones de interés en celdas de combustible [4], y la capacidad de almacenar y proteger moléculas de interés biológico [5].

[1] T. Kitao, Y. Zhang, S. Kitagawa, B. Wang, T. Uemura, Chem. Soc. Rev. 46 (2017) 3108–3133.

[2] L.D. Sappia, J.S. Tuninetti, M. Ceolín, W. Knoll, M. Rafti, O. Azzaroni, Global Challenges, 4 (2020), 70021.

[3] G. Laucirica, J.A. Allegretto, M.F. Wagner, M.E. Toimil-Molares, C. Trautmann, M. Rafti, W. Marmisollé, O. Azzaroni. Adv. Mat. 34 (2022), 2207339.

[4] F.López, A.I. Bertoni, J.A. Allegretto, W.A. Marmisollé, O. Azzaroni, M. Rafti, D. Grumelli, Chem. Cat. Chem. 14 (2022), e202201015.

[5] J.S. Tuninetti, M.P. Serrano, A.H. Thomas, O. Azzaroni, M. Rafti, Industrial & Engineering Chemistry Research, 59 (2020), 22155–22162.



XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



**INGENIERÍA DE DEFECTOS, HETEROESTRUCTURAS Y TRANSICIONES DE FASE EN
REDES METAL-ORGÁNICAS: OPORTUNIDADES PARA EL DISEÑO DE MATERIALES
FUNCIONALES**

M.C. Bernini

*Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI, CONICET–UNSL), San Luis, Argentina.
celeste.bernini@gmail.com*

Palabras claves: MOFs; DEFECTOS; TRANSICIONES DE FASE

Las redes metal-orgánicas (MOF) son polímeros de coordinación 2D o 3D cuyas arquitecturas poseen un volumen libre potencial.[1] Tras más de dos décadas de investigación en este campo, el número de estructuras tipo-MOF ha aumentado a más de 100000 en el subconjunto CSD.[2] En este gran número de estructuras cristalinas, las aplicaciones más destacadas de estos materiales son muy variadas y abarcan campos como la salud, la energía y el medio ambiente. La composición y las propiedades de las distintas fases están correlacionadas, pudiendo cambiar si hay transiciones de fase.

Una herramienta fascinante para modificar las propiedades de los MOF es la *ingeniería de defectos*. [3] El término "defectos" se refiere a "cualquier desviación de una estructura cristalina idealmente ordenada". El objetivo de la ingeniería de defectos es manipular la composición química y la estructura regular de los MOF introduciendo alteraciones específicas en su estructura original para optimizar sus propiedades y mejorar su aplicabilidad.[4] Un caso especial de defectos es el de introducir ligandos diferentes o iones metálicos diferentes, conservando la misma arquitectura de red, lo que da lugar a MOF multivariados. Por ejemplo, el dopaje controlado con ciertos iones lantánidos sobre una determinada matriz es una estrategia de ingeniería de defectos para generar MOF luminiscentes eficaces. Adicionalmente, incorporar ligandos con grupos funcionales "extra" a los coordinantes permite generar puntos de anclaje o reconocimiento en procesos de sensado.

Por otra parte, el conocimiento de la estabilidad estructural de una fase específica es crucial para superar los estudios fundamentales y alcanzar las aplicaciones. Sin embargo, si bien la investigación sobre las *transiciones de fase* es esencial; la gran cantidad de arquitecturas MOF reportadas [2] no se correlaciona adecuadamente con los estudios de estabilidad de las mismas.

Además de su cuestionada estabilidad estructural, otra posible limitación para el uso generalizado de MOFs podría deberse a sus morfologías en forma de polvos que dificultan su implementación, por lo que una manera de acortar la brecha para su aplicabilidad práctica es mediante la ingeniería de *heteroestructuras* que en este contexto involucra la creación de materiales compuestos formados por al menos dos MOFs diferentes (MOF-sobre-MOF), o por un MOF y otro material funcional (MOF-sobre-soporte).[5]

En esta conferencia se describirán estudios realizados en nuestro grupo de trabajo enfocados en *ingeniería de defectos* en MIL-100(Fe), en la *transición de fase* 3D a 1D del MOF-76($Y_{0.95}Eu_{0.05}$) [6] y en la generación de *heteroestructuras* basadas en MOF-sobre-soportes, como ejemplos de estrategias para diseñar materiales funcionales de mayor aplicabilidad.

[1] S.R. Batten, N.R. Champness, X.-M. Chen, J. García-Martínez, S. Kitagawa, L. Öhrström, M. O’Keeffe, M.P. Suh, J. Reedijk, Pure Appl. Chem., 85(8) (2013) 1715–1724.

[2] <https://support.ccdc.cam.ac.uk/support/solutions/articles/103000306242-how-many-mofs-are-there-in-the-csd->

[3] A.K. Cheetham, T.D. Bennett, F.-X. Coudert, A.L. Goodwin, Dalton. Trans. 45 (2016) 4113–4126.

[4] J. Ren, M. Ledwaba, N.M. Musyoka, H.W. Langmi, M. Mathe, S. Liao, W. Pang, Coord. Chem. Rev. 349 (2017) 169–197.

[5] K.T. Smith, A.K. Yadav, K.C. Stylianou Nat. Commun. 16 (2025) 7986.

[6] Z. L. Moreno Botello, M. Illescas, B. C. Barja, S. E. Collins, G. E. Narda, M. C. Bernini CrystEngComm 2025, 27, 4470–4487.



EL ROL DE LOS BORDES DE FASE MORFOTROPICOS EN LAS PROPIEDADES PIEZOCATALITICAS DE MATERIALES

N. Pellegrini^{a*}, S. Barolin^a, N. Mamana^a, A. Di Loreto^a, R. Machado^a, M.V. Roldán^a

^a Instituto de Física Rosario- CONICET – FCEIyA – UNR, 27 de Febrero 210 Bis, Rosario

*pellegrini@ifir-conicet.gov.ar

Palabras claves: PIEZOCATÁLISIS; BORDE DE FASE MORFOTRÓPICO; PZT; BCZT

La creciente demanda de dispositivos electrónicos compactos y portátiles impulsa la necesidad de materiales más eficientes para la recolección, conversión y almacenamiento de energía. En este contexto, los materiales piezoeléctricos, como los cerámicos de perovskita ABO_3 , se destacan por su capacidad de transformar energía mecánica en química, lo que los hace útiles para la remediación de contaminantes.

El $BaTiO_3$ es uno de los materiales más estudiados, pero su bajo coeficiente piezoeléctrico limita su rendimiento. Una posible estrategia para mejorar estas propiedades es la modificación de su composición mediante aditivos. En este trabajo, se propone la obtención de $Ba_{0.85}Ca_{0.15}Zr_{0.1}Ti_{0.9}O_3$ (BCZT) mediante las técnicas de reacción de estado sólido y sol-gel, evaluando su actividad piezocatalítica. La composición seleccionada corresponde al borde de fase morfotrópico (MPB) del BCZT, donde es sabido que se optimizan las propiedades piezoeléctricas.

La investigación también se centra en la síntesis de polvos piezoeléctricos, como $PbZr_{0.52}Ti_{0.48}O_3$ (PZT), y sus variantes dopadas con Nb^{5+} (PZTNb) y $Nb^{5+} + Fe^{3+}$ (PZTFN), con el objetivo de explorar su actividad piezocatalítica, buscando realzar las propiedades piezoeléctricas acercándonos al MPB.

Estos materiales se caracterizan mediante diversas técnicas para evaluar sus propiedades ferroeléctricas, piezoeléctricas y su capacidad para degradar contaminantes orgánicos, como los colorantes Naranja de Metilo y Azul de Metileno, utilizando ultrasonido como fuente de energía mecánica principalmente. Se muestra además la vinculación entre las propiedades obtenidas y el rol de la cercanía composicional con los MPB en cada sistema estudiado.

Los resultados indican que el PZTFN tiene la mejor capacidad de conversión de energía mecánica en química, aunque con un rendimiento piezoeléctrico inferior al del PZTNb, ambos siendo más eficientes que el PZT puro [1].

Por lo tanto, en este trabajo se presenta el rol de los MPB en el comportamiento piezocatalítico de diversos materiales con el objetivo de hacer más eficiente la conversión de energía mecánica en química con fines catalíticos.

[1] S. Barolin, M.V. Roldán, M. Perretta, N. Pellegrini, J. Mater. Sci.: Mater Electron, 36 (2025) 715.



ORIENTACIÓN PREFERENCIAL EN PELÍCULAS DE DIÓXIDO DE ESTAÑO PREPARADAS POR SPRAYING
R. Parra

*Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), CONICET
Universidad Nacional de Mar del Plata
rparra@fi.mdp.edu.ar*

Palabras claves: ÓXIDOS CONDUCTORES; ELECTRODOS TRANSPARENTES; SPRAY-PYROLYSIS

Las películas transparentes de óxidos conductores (TCO) tienen aplicación en un gran número de dispositivos de uso masivo como pantallas táctiles, celdas solares, ventanas eficientes energéticamente y otros en los que se requiere un contacto o electrodo transparente.[1] Sin embargo, la relación inversa que rige entre transparencia y conductividad constituye un desafío en el desarrollo de TCOs con propiedades equivalentes a las del óxido de indio dopado con estaño (ITO). Las películas de óxido de cinc y dióxido estaño son alternativas prometedoras para la fabricación de TCOs dadas su alta transparencia en la región visible del espectro y su (relativamente) baja resistividad.[2] Una manera de reducir la resistividad de estas películas implica el uso de dopantes para introducir defectos (vacancias de oxígeno, impurezas intersticiales o sustitucionales) que incrementen la densidad de portadores de carga (N). Sin embargo, tenemos que considerar que la transparencia de la película disminuye conforme N aumenta.[3] En este sentido, una de las estrategias más interesantes para sortear el inconveniente consiste en disminuir la resistividad del recubrimiento mediante el incremento de la movilidad (μ) de los portadores, manteniendo N en valores elevados sin comprometer la transmitancia en la región visible.[4] Nuestro grupo trabaja en el crecimiento de películas transparentes, conductoras, de dióxido de estaño para diferentes aplicaciones. En esta oportunidad se presentarán los resultados recientes sobre el uso de dopantes y la influencia de la orientación cristalina preferencial sobre las propiedades eléctricas de películas de dióxido de estaño con espesores entre 200 y 500 nm.

[1] A.I. Hofmann, E. Cloutet, G. Hadziioannou, *Adv. Electron. Mater.* (2018) 1700412.

[2] Z. Zheng Wang, X. Chen, A. Sun, L. Liu, Y. Chen, L. Hu, D. Zhang, H. Ren, Y. Liu, J. Shi, B. Yu, G. Hou, P. Yang, Y. Zhao, X. Zhang, *Solar Energy Mater. Solar Cells*, 293 (2025) 113835.

[3] A. Münzer, M. Weittenhiller, M. Bivour, F. Meyer, S.W. Glunz, *Thin Solid Films* 825 (2025) 140743.

[4] J.T. Wang, X.L. Shi, W.W. Liu, X.H. Zhong, J.N. Wang, L. Pyrah, K.D. Sanderson, P.M. Ramsey, M. Hirata, K. Tsuru, *Sci. Rep.*, 4 (2014) 3679.



DISTRIBUCIÓN CATIONICA Y ESTRUCTURA LOCAL EN FERRITAS NANOCRISTALINAS: UN ENFOQUE MULTITÉCNICA BASADO EN ABSORCIÓN Y EMISIÓN DE RAYOS X

M.E. Saleta

Instituto Balseiro, U.N. Cuyo – CNEA e Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche, CNEA, S.C. de Bariloche, Argentina.

martin.saleta@ib.edu.ar

Palabras claves: INVERSIÓN CATIONICA; EXAFS, ESTRUCTURA ESPINELA; MATERIALES FUNCIONALES

Las nanopartículas (NPs) de ferritas mixtas con fórmula general $M_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ ($M = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$) presentan un gran potencial para aplicaciones funcionales, tanto magnéticas como catalíticas. Particularmente, CoFe_2O_4 (CFO) destaca por su elevada anisotropía magnetocristalina y coercitividad, características propias de una ferrita dura, lo que la hace atractiva para imanes permanentes y sensores. Desde el punto de vista estructural, se ha demostrado que el tamaño de partícula influye fuertemente en la localización de los iones Co y en el grado de inversión de la espinela, afectando directamente sus propiedades magnéticas [1]. En el ámbito catalítico, estas ferritas son materiales promisorios en procesos de oxidación avanzada, bajo condiciones ácidas [2].

Este trabajo presenta un estudio multitécnica orientado a correlacionar la distribución cationica, el orden magnético y la actividad catalítica de estas NPs. Se utilizaron técnicas de radiación sincrotrón, como la espectroscopía de absorción de rayos X (EXAFS), y la espectroscopía de emisión de Rayos X no resonante (XES).

Los estudios EXAFS efectuados en los bordes K de los cationes 3d resultaron esenciales para la determinación del entorno cristalino local, posibilitando la cuantificación del grado de inversión estructural en la espinela. (Fig. 1). En paralelo, los espectros XES confirmaron la presencia de especies Co^{3+} en estado de alto espín. En particular, en el caso de ferritas mixtas, EXAFS permitió correlacionar la presencia de Fe^{2+} octaédrico con una mayor eficiencia catalítica, observada mediante EPR a través de la generación de especies reactivas de oxígeno (ROS) bajo condiciones ácidas. Estos resultados destacan la utilidad de EXAFS y XES como herramientas para el estudio de materiales donde la ingeniería de la estructura local, la ocupación de sitios cristalográficos y los estados electrónicos son determinantes para la sintonización de propiedades funcionales. Este enfoque contribuye al desarrollo racional de materiales basados en ferritas con aplicaciones avanzadas en magnetismo y catálisis ambiental.

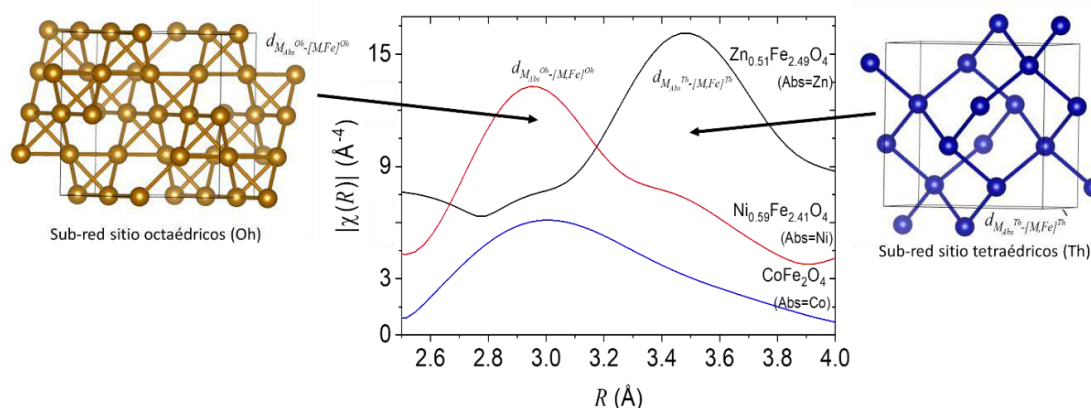


Figura 1. $k^3\chi(k)$ con corrección de fase para nanoferritas $M_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$); borde K de Co, Ni y Zn. Sub-redes de sitios octaédricos (izq.) y tetraédricos (der.).

[1] B.N. Pianciola, E. Lima Jr., H.E. Troiani, L.C.C.M. Nagamine, R. Cohen, R.D. Zysler, J. Magn. Magn. Mater. 377 (2015) 44–51.

[2] M.E. Saleta, et al., J. Mater. Chem. C (2025). Accepted manuscript. DOI: 10.1039/D5TC01732G.



ANTIBIOTIC-MEDIATED REGULATION OF HISTIDINE KINASES IN RESISTANT PATHOGENS

L.I. Llarrull^{a,b*}, M.D. Peralta^a, I.P. Palanca^a, I.P. Suarez^a, C. Rodriguez Aieta^a, M.B. Antinori^a

^a Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) - Rosario - Santa Fe - Argentina.

^b Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario - Rosario - Santa Fe - Argentina.

*llarrull@ibr-conicet.gov.ar

Keywords: ANTIBIOTIC RESISTANCE; TWO COMPONENT SYSTEMS; β -LACTAMS, GLYCOPEPTIDES

Understanding antibiotic resistance mechanisms and developing strategies to combat them is a global research priority. The rapid emergence of resistant bacteria, coupled with a dwindling pipeline of new antibiotics and reduced pharmaceutical investment, poses a significant threat to public health. To address this challenge, it is crucial to identify novel targets for the development of compounds with mechanisms distinct from those of existing antibiotics or, alternatively, to identify novel targets to block the activation of resistance mechanisms. In this context, our research focuses on the sensor/transducer membrane proteins of antibiotic-inducible systems in two clinically relevant pathogens: *Staphylococcus aureus* and *Vibrio parahaemolyticus*. These sensor/transducer proteins are integral elements of bacterial two-component systems (TCS) and represent promising targets for inhibitors aimed at restoring the efficacy of β -lactam and glycopeptide antibiotics. We investigated the mechanism underlying activation by β -lactams and glycopeptides of the histidine kinases VraS (*S. aureus*) and VbrK (*V. parahaemolyticus*). We combined assays with clinical antibiotics, antibiotic-derived photoprobes and fluorescent antibiotics; and a variety of complementary techniques, including saturation transfer difference (STD) NMR spectroscopy, luminescence resonance energy transfer, stopped-flow kinetic studies, isothermal titration calorimetry and X-Ray crystallography. We characterized the interaction of VraS with β -lactams and glycopeptides and of VbrK with β -lactams. In addition, we studied the interaction of the sensor proteins with other proteins, of unknown function, that are encoded in the same operons and which we propose modulate signal transduction. Our findings highlight histidine kinases as key antibiotic sensors and promising drug targets against resistance in pathogenic bacteria, while also suggesting that accessory proteins may contribute to regulating the activation of these two-component systems.

Acknowledgements: This work was supported by grants from Agencia I+D+i (PICT-2018-3362 and PICT-2020-SERIEA-3773); from CONICET (PIP 22920160100039CO); from ASaCTei (PEICID-2021-078); from the Swiss National Science Foundation (SPIRIT-SNF 216518).



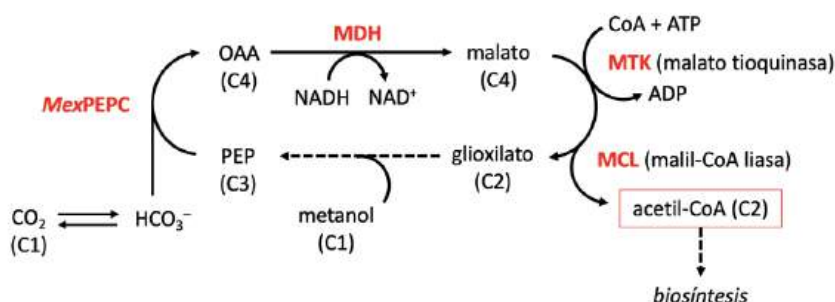
AVANCES EN LA CARACTERIZACIÓN DE *MexPEPC*, UNA ENZIMA CLAVE PARA LA FIJACIÓN DE CARBONO NO FOTOSINTÉTICA EN *METHYLORUBRUM* SP.

J. M. González

Instituto de Bionanotecnología del NOA, INBIONATEC (CONICET-UNSE), Santiago del Estero.
biojmg@gmail.com

Palabras claves: FIJACIÓN DE CARBONO; METILÓTROFOS; CARBOXILASAS; CAMBIO CLIMÁTICO

Las bacterias metilotróficas como *Methylobacterium extorquens* (Mex) exhiben la capacidad de crecimiento con metanol como única fuente de carbono y energía. Considerando que el metanol se puede producir por reducción electroquímica del dióxido de carbono empleando fuentes de energía renovables, el metabolismo metilotrófico abre la posibilidad de producir biomasa con valor agregado en forma sustentable. La enzima central para fijación de CO₂ en este organismo es la fosfoenolpiruvato (PEP) carboxilasa (*MexPEPC*), que fija bicarbonato como oxaloacetato (OAA) a partir de PEP. El poder reductor se obtiene de la oxidación del metanol a formaldehído (y posteriormente a metileno-tetrahidrofolato, y hasta CO₂ en ciertas condiciones) mediante una metanol deshidrogenasa periplasmática [1]. Finalmente, por acción en serie de las enzimas de la vía de la Serina [1]: malato deshidrogenasa (MDH), malato tioquinasa (MTK), y malil-CoA liasa (MCL); a partir de dos unidades monocarbonadas (C1) se produce acetato (C2) como acetil-CoA, el cual es la unidad C2 que permite el resto de los procesos biosintéticos de la célula (*ver esquema*).



En esta presentación discutiremos nuestras últimas investigaciones sobre la relación estructura-función de las enzimas MTK, MCL y *MexPEPC* que forman un módulo “MMP” capaz de fijar CO₂ y metanol como acetil-CoA. En contraste con el ciclo de Calvin ubicuo en plantas, algas y cianobacterias, que dependen de la carboxilasa RuBisCO, este módulo de fijación-asimilación de carbono actúa en forma independiente de la luz y los niveles de oxígeno molecular. Por lo tanto, el interés en esta vía radica en su aplicabilidad para el diseño de vías sintéticas de fijación de carbono. En nuestro grupo logramos clonar y purificar dichas enzimas, mientras que realizamos pruebas de cristalización de *MexPEPC*, así como ensayos de actividad *in vivo*, expresando el módulo MMP en *E. coli* y evaluando el impacto en su crecimiento en distintas fuentes de carbono. Asimismo, aplicamos métodos bioinformáticos, biofísicos y modelado estructural de proteínas con Chai-1 [2] para interrogar sobre los mecanismos de acción y posibles mecanismos de inhibición del módulo MMP por retroalimentación.

[1] A.M. Ochsner, F. Sonntag, M. Buchhaupt, J. Schrader, J.A. Vorholt, Appl Microb Biotech. 99 (2015) 517–534.

[2] J. Boitreaud, J. Dent, M. McPartlon, J. Meier, V. Reis, A. Rogozhnikov, K. Wu, BioRxiv (2024).



**XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr**
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



LINARX: EL NUEVO LABORATORIO MULTI-TÉCNICAS DE RAYOS X DEL NOA

D. Comedi^{a*}, G. Bridoux^a, O. Marin-Ramírez^a, B. Straube^a, M.R. Tolosa^a, N.C. Vega^a, E.M. Insabella^a

^a Laboratorio de Investigación y Análisis por Rayos X (LINARX), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán, e Instituto de Física del Noroeste Argentino – INFNOA (CONICET-UNT), San Miguel de Tucumán

*dcomediherrera@unt.edu.ar

Palabras claves: RAYOS X; SEMICONDUCTORES, NANOESTRUCTURAS, LÁMINAS DELGADAS

En esta oportunidad, presentaremos ante la comunidad de la Asociación Argentina de Cristalografía el nuevo laboratorio multi-técnicas de rayos X del Noroeste argentino, el Laboratorio de Investigación y Análisis por Rayos X (LINARX) del Instituto de Física del Noroeste Argentino - INFNOA (CONICET-UNT) y del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología de la Universidad Nacional de Tucumán.

Este laboratorio, inaugurado este año, alberga principalmente un sistema Empyrean de tercera generación de Malvern Panalytical equipado para poder realizar medidas de difracción de rayos X (DRX) en distintas geometrías (incidencia y/o detección rasante, reflexión o transmisión), reflectometría, DRX de alta resolución, microdifracción, mapa de espacio recíproco, tomografía computada, y dispersión de rayos X en bajo ángulo (SAXS), así como en incidencia rasante (GISAXS) o variantes como USAXS y WSAXS. El equipo tiene además accesorios que permiten medir, con fuente de Cu o Ag, muestras líquidas o en función de la temperatura en ambiente controlado. Este instrumento y sus accesorios fueron adquiridos mediante el Programa Equipar Ciencia mediante un proyecto impulsado desde el INFNOA, avalado por el Centro Científico Tecnológico CONICET – NOA Sur y CONICET Casa Central, y está actualmente operativo en un 90% de su capacidad, el 10% faltante todavía pendiente de la llegada de más componentes desde el exterior.



Figura 1. Difractómetro Empyrean *multicore* para radiación de Cu y detector Pixel3D del LINARX

En la misma oportunidad, presentaremos los distintos proyectos de investigación de los grupos del INFNOA asociados al LINARX, tales como los del Laboratorio de Física del Sólido (LAFISO), el Laboratorio de Nanomateriales (LN) y el grupo de investigación NanoProject, así como algunos de sus resultados recientes y preliminares. Estos proyectos abarcan desde estudios fundamentales de semiconductores cristalinos y policristalinos, láminas delgadas epitaxiales, nanohilos y otras nanoestructuras para aplicaciones en optoelectrónica, conversión fotovoltaica y remediación ambiental. Los métodos utilizados para la fabricación de los semiconductores explorados son transporte de vapor, deposición por láser pulsado, deposición química de vapor a baja temperatura, síntesis solvotermal e hidrotetmal, sol-gel, doctor blade, coprecipitación, entre otros.

A stylized illustration featuring a rainbow with four distinct bands of yellow and orange, arching over a range of blue, geometric mountains. The mountains are composed of various shades of blue and white, creating a layered, crystalline effect. The entire scene is set against a light blue background with faint geometric patterns in the corners.

Contribuciones Orales



ESTUDIOS ESTRUCTURALES DE NUEVOS POLÍMEROS DE COORDINACIÓN 3D QUIRALES DE COBRE

J.M. Rey^{a*}, F. Di Salvo^a

^a DQIAQF / INQUIMAE – CONICET, FCEN, UBA, Buenos Aires, Argentina

*juanmarey@qi.fcen.uba.ar

Palabras claves: AMINOÁCIDOS; COMPLEJOS DE COBRE; METAL ORGANIC FRAMEWORKS; QUIRALIDAD

Los aminoácidos constituyen una de las fuentes más accesibles de compuestos quirales enantioméricamente puros. Debido a sus grupos funcionales donores de N y O, junto con la posibilidad de ser modificados para añadir más sitios de coordinación, estas moléculas sirven como excelentes ligandos en la síntesis de complejos metálicos [1]. Además, su variedad de modos de coordinación posibilita la formación de estructuras quirales y biocompatibles con arquitecturas unidimensionales, bidimensionales o tridimensionales. En este contexto, el empleo de aminoácidos como ligandos en sistemas de coordinación biomiméticos representa una estrategia prometedora para el diseño de nuevos catalizadores [2].

En nuestro grupo de investigación, nos centramos en la síntesis de compuestos derivados de aminoácidos (bases de Schiff reducidas) que conservan los grupos funcionales amino y carboxilo [3–6]. En trabajos anteriores, describimos una serie de complejos de cobre con potencial como catalizadores biomiméticos para la conversión de nitrito en óxido nítrico [6]. En este caso, presentamos dos nuevos complejos de cobre obtenidos a partir de un ligando derivado del ácido L-aspartico, que incorpora un grupo carboxilato adicional capaz de formar un enlace de coordinación, y 4-carboxipiridina, que introduce un sitio donador de nitrógeno de tipo piridina (Figura 1). Aunque la química de coordinación de este ligando ha sido previamente explorada con otros metales [7,8], no se habían reportado estudios sobre su coordinación con cobre.

Los complejos se obtuvieron a partir de una solución acuosa del ligando, la sal de cobre y amoníaco concentrado [6]: la volatilización lenta del amoníaco permite su reemplazo por el ligando en los sitios de coordinación. Al variar la proporción metal:ligando, obtuvimos exitosamente dos nuevas estructuras tridimensionales quirales (**1** y **2**). Aunque ambas presentan el mismo modo de coordinación, el ligando adopta diferentes conformaciones debido a su flexibilidad. La caracterización estructural y el estudio de sus propiedades se realizaron mediante difracción de rayos X de monocristal.

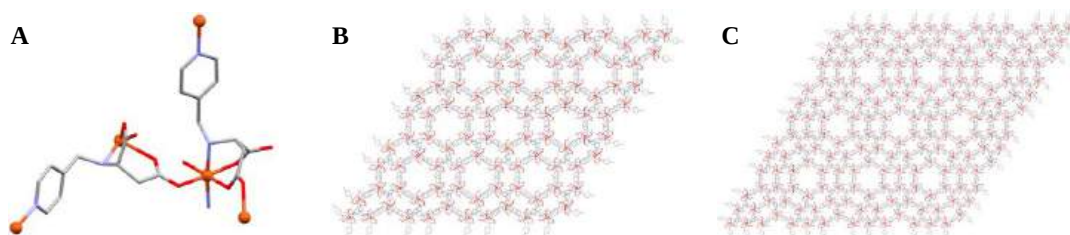


Figura 1. Estructura del ligando y modo de coordinación del cobre (A), estructura del complejo **1** (B) y estructura del complejo **2** (C), obtenidas por difracción de rayos X de monocristal. Los H y las aguas de hidratación fueron omitidos por claridad. Código de colores: C = gris, N = celeste, O = rojo, Cu = naranja.

- [1] R. Ganguly, B. Sreenivasulu, J.J. Vittal, *Coord. Chem. Rev.*, 252 (2008) 1027–1050.
- [2] S. Itoh, M. Kitamura, Y. Yamada, S. Aoki, *Chem. Eur. J.*, 15 (2009) 10570–10584.
- [4] F. Movilla, J.M. Rey, C. Huck-Iriart, F. Di Salvo, *Cryst. Growth Des.*, 21 (2021) 3487–3499.
- [5] F. Movilla, J.M. Rey, M. Saleta, E. Spodine, P. Cancino, F. Di Salvo, *Inorg. Chem.*, 62 (2023) 17136–17149.
- [6] F. Movilla, J.M. Rey, M. R. López Borda, F. Di Salvo, *Acta Cryst.*, C81 (2025) 64–76.
- [7] J.M. Rey, F. Movilla, S.A. Suárez, F. Di Salvo, *Acta Crystallogr. Sect. B.*, 78 (2022) 520–536.
- [8] X.L. Yang, M.H. Xie, C. Zou, F.F. Sun, C.D. Wu, *Cryst. Eng. Comm.*, 5 (2011) 1570–1579.
- [9] C. Wang, N. Zhang, C.Y. Hou, XX. Han, Y.H. Xing, F.Y. Bai, L.X. Sun, *Transit. Met. Chem.*, 45 (2020) 423–433.



DESCUBRIMIENTO DE UN NUEVO POLIMORFO DE MEBENDAZOL

E.L. Gutiérrez^{a*}, M.G. Russo^a, E.V. Brusau^a, M.C. Bernini^a, F. Di Salvo^b

^a Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI, CONICET–UNSL), San Luis, Argentina. ^b Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE, CONICET–UBA), CABA, Argentina.

*egutierrez@unsl.edu.ar

Palabras claves: ANTIHELMÍNTICOS; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; POLIMORFISMO; SINCROTRÓN

En los últimos 30 años, a través de un gran número de ejemplos y casos de estudio, se ha demostrado la tendencia de los sólidos farmacéuticos a cristalizar en múltiples formas cristalinas. Este fenómeno, denominado polimorfismo, puede afectar las propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas del fármaco por lo que es muy importante detectar y analizar las formas polimórficas, y estudiar su desempeño.[1] Mebendazol (MBZ) es un antihelmíntico sintético de amplio espectro, incluido en la Lista Modelo de Medicamentos Esenciales de la OMS y clasificado según el Sistema de Clasificación Biofarmacéutica como Clase II. Hasta el momento, se conocían tres polimorfos tautoméricos denominados MBZ A (tautómero 3*H*, grupo espacial, GE, $P\bar{1}$), MBZ B (tautómero imino, GE $P2_1/c$) y MBZ C (tautómero 1*H*, GE, $P\bar{1}$), siendo este último el preferido terapéuticamente. Estos sólidos presentan diferencias notables en sus propiedades fisicoquímicas y en su biodisponibilidad y pueden interconvertirse en el estado sólido por efectos del calor y la humedad.[2]

Un nuevo polimorfo de MBZ (**Tabla 1**) fue obtenido por recrystalización de MBZ C con ácido fluorhídrico en metanol. La comparación del difractograma de rayos X de polvos de este sólido con los patrones calculados de los polimorfos conocidos de MBZ muestra que se trata de una nueva fase. La estructura cristalina fue determinada por difracción de rayos X de cristal único en la línea Manacá en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS, Sirius) en Campinas, Brasil. La unidad asimétrica (**Figura 1**) consiste en dos moléculas del tautómero 3*H* que forman un homosintón supramolecular cíclico $R_2^2(8)$. Esta nueva fase es un polimorfo propiamente dicho de MBZ A. Con base en esta observación, este nuevo material se denominó MBZ A2.

Tabla 1. MBZ A2

T = 100(2) K
 λ = 0,6702 Å
GE: $P2_1/c$ (14)
 a = 13,578(4) Å
 b = 7,478(2) Å
 c = 27,526(7) Å
 α = 90°
 β = 103,994(4)°
 γ = 90°
 V = 2711,94 Å³

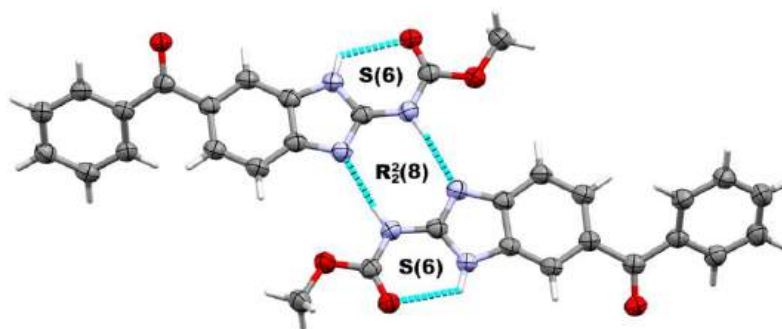


Figura 1. Unidad asimétrica del nuevo polimorfo de MBZ

Debido a la relevancia de la problemática del polimorfismo en la industria farmacéutica, es de particular importancia la determinación de un modelo estructural del nuevo polimorfo. Actualmente, nos encontramos llevando a cabo una caracterización exhaustiva de MBZ A2 con el objetivo de estudiar su estabilidad térmica, perfil de solubilidad y la relación termodinámica y cinética con los polimorfos del fármaco.

[1] J. Bernstein, *Polymorphism in Molecular Crystals*, Oxford University Press, New York, 2020

[2] N.L. Calvo, T.S. Kaufman, R.M. Maggio, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 122 (2016) 157–165

This work was also supported by the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS), Campinas, Brazil. The Manacá beamline staff and, especially Dr. Andrey Fabricio Ziem Nascimento, are acknowledged for their assistance during the experiment 20243047 and the subsequent data processing.

The author(s) are grateful to the FAIRE programme provided by the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) for the opportunity to use the Cambridge Structural Database (CSD) and associated software.



IRON SULPHIDE MONOCRYSTALS IN THE ORIGIN OF LIFE: FROM SOUP TO PRIMORDIAL PIZZA?

V.G. Franco^{a,b,*}, G.F. Goya^{a,c}

^a Inst. Nanociencia y Materiales de Aragón, CSIC-Univ. de Zaragoza, Campus Río Ebro, 50018 Zaragoza, Spain

^b Facultad de Bioquímica, Universidad Nacional del Litoral, Ciudad Universitaria, 3000 Santa Fe, Argentina

^c Depto de Física de la Materia Condensada, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain

*vgfranco@fbc.unl.edu.ar

Keywords: PYRITE; MONOCRYSTAL; SELF-ASSEMBLED; BIOMOLECULES; SURFACES

The ‘bottom-up’ approach attempts to understand how life arose by studying prebiotic and primordial biochemical processes under the conditions of the early Earth. In a legendary experiment, Miller recreated the conditions of the primitive atmosphere by introducing water vapour, methane, hydrogen and ammonia into a container and subjecting the mixture to electrical discharges to simulate thunderstorms. This resulted in the formation of various amino acids. This experiment produced monomers, which are all essential biomolecules for the formation of life. This mixture of molecules dissolved in water was called *the primordial soup*. However, due to the difficulty of polymerising monomers in solution, Wächtershäuser proposed an alternative hypothesis: the iron-sulphur world. According to this hypothesis, the first organisms arose from prebiotic chemistry dependent on pyrite surfaces. This mineral has a positive charge which attracts negatively charged molecules. This explains how CO₂ is fixed in organic molecules without the need for enzymes and coenzymes, due to the autocatalytic activity of the surface. The system formed by the surface and the synthesised biomolecules is called *the primordial pizza*.

In this study, ordered amino acid structures and superstructures were obtained by adsorbing L-Cysteine onto (100) surfaces of pyrite in situ (Fig.1). The nanomechanical properties—Young's modulus, adhesion, dissipation, and deformation—were measured using Peak Force Quantitative Nanomechanics (QNM)-Atomic Force Microscopy (AFM), and the structures were chemically characterised using X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS). Simple tetragonal structures were observed that were joined together to form superstructures. Chemical analysis reveals the formation of iron-sulphur and peptide bonds, indicating that these structures are polymeric and bound to the surface, rather than self-assembled. This is the first report of an ordered amino acid polymer that can be correlated with ancestral electron-transporting proteins, such as rubredoxin, which are fundamental to oxidation-reduction reactions and are present in bacteria and archaea.

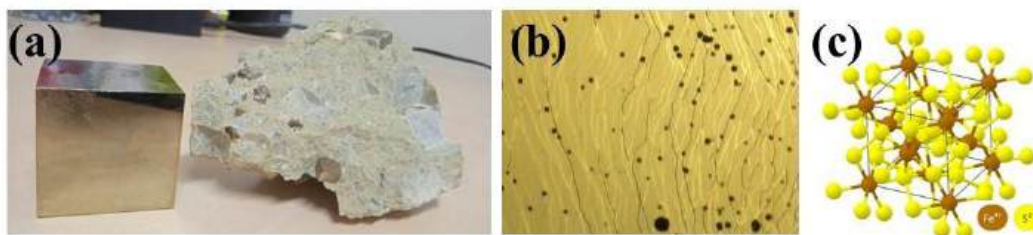


Figure 1. (a) Natural pyrite single crystal. (b) Pyrite surface immersed in L-cysteine solution. (c) Pyrite crystalline structure cubic with angles of 90°

[1] S.L. Miller, Science 117(3046) (1953) 528–529.

[2] G. Wächtershäuser, System. Appl. Microbiol. 10 (1988) 207–210.

[3] V.G. Franco, S.J. Rodríguez, F.C. Calaza, M.C.G. Passeggi, G. Ruano, Nanoscale 16 (2024) 15366–15380.

[4] S. Galvez-Martinez, E. Escamilla-Roa, M.P. Zorzano, E. Mateo-Marti, Appl. Surf. Sci. 530 (2020) 1471823.

[5] E. Kotopoulou, M. Lopez-Haro, J.J. Calvino Gamez, J.M. García-Ruiz, Angew. Chem. Int. Ed. (2021) 601396–1402.



XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



EL VELERO DE CRISTAL: LA PRUEBA PILOTO

A.M.R. Niro^a, F. Saulino^b, R. Annio^b, J.P. Rivero González^c, V.N. Gavilán^d, A.R. Canabal^e, V.C. Fuertes^{f*}

^a Colegio La Sagrada Familia y Universidad Nacional de San Martín, Buenos Aires, Argentina

^b Instituto Nuestra Señora de La Merced, Caseros, Diócesis de San Martín, Buenos Aires, Argentina

^c Departamento de Didácticas Específicas de la Facultad de Educación, Universidad de La Laguna, Tenerife, España

^d Instituto Secundario Juan Pascual Pringles, Dpto. de Ciencias Naturales, Vicuña Mackenna, Córdoba, Argentina

^e Instituto Superior de Formación Docente 209, Universidad Nacional de Tres de Febrero, Buenos Aires, Argentina

^f Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba-CONICET, Dpto. de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina

*vfuentes@unc.edu.ar

Palabras claves: VALORES; LITERATURA; ARTE; CRISTALOGRAFÍA; CREATIVIDAD

Repensar el rol docente desde una perspectiva holística que trascienda lo meramente técnico para abrazar la dimensión humanística y social de la educación pretende generar una *cultura del encuentro*. Distintas áreas como las ciencias sociales o las ciencias experimentales, cuando buscan el bien de sus estudiantes y comparten su trabajo, dan lugar a posibilidades insospechadas. Nuestra propuesta pedagógica de educación en valores y desarrollo humano integral para profesionales de la educación de los primeros niveles, incluye el descubrimiento de los cuatro niveles de realidad [1] centrados en el estudiante como persona, la capacidad de transformar la literatura, el arte y las ciencias en elementos transdisciplinarios y metodológicos para la educación en valores, junto con el descubrimiento de la belleza, la bondad y la verdad como caminos hacia una genuina creatividad personal. Para ello, se propuso utilizar dichos instrumentos para el descubrimiento de los valores, enmarcándolos en un proyecto denominado “El Velero de Cristal”.

Este proyecto abordó varios enfoques. Por un lado, la lectura gradual y cuidadosa del libro homónimo cuyo autor es el reconocido literato José Mauro de Vasconcelos (Fig. 1a). Dicha lectura, paulatina, grupal y en voz alta, permitió a los jóvenes estudiantes extraer, capítulo a capítulo, los valores humanos plasmados en el libro. Gracias a la literatura, esa capacidad de reconocimiento de valores permitió plasmar sus sensaciones y emociones a través del arte (Fig. 1b). En la Fig. 1c puede verse un cartel que refleja uno de los valores descubiertos por un estudiante.

Asimismo, se aprendió sobre Cristalografía, la ciencia transdisciplinaria que estudia a los cristales y su estructura interna (Fig. 1d) y que, a través de su riqueza estética y posibilidades creativas, permite amalgamar la práctica científica con las ciencias sociales y humanas, vinculadas por la experiencia de la belleza y la verdad, mediante las cuales pueden descubrirse valores gestantes de un cambio social que promueva el bienestar físico y mental. Entonces, mediante el crecimiento cristalino los estudiantes pudieron crear su propio Velero de Cristal cuya ala posee sacarosa cristalizada y su bote fue cubierto por sulfato de cobre (Fig. 1e).

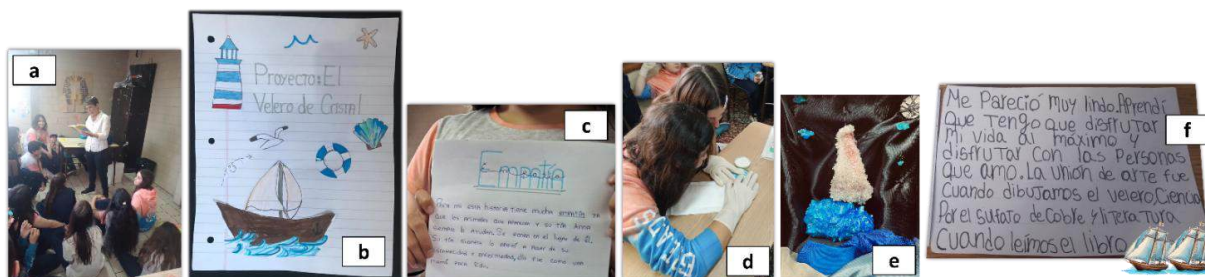


Figura 1. Diferentes momentos de *encuentro* en el desarrollo de “El Velero de Cristal”

Este proyecto resume algunas claves para el desarrollo de habilidades blandas, entre ellas, la creatividad y la flexibilidad mental. Asimismo, despierta la curiosidad y la exploración, promueve el pensamiento crítico y original, la autenticidad y la autoexpresión, la apertura a la experiencia, la colaboración, la interacción social y la creación artística, como bien resume la Fig. 1f.

[1] Cfr. A. López Quintás, La experiencia estética y su valor formativo. Universidad de Deusto, p. 417, Bilbao (2004).



ESTUDIO DE LA EVOLUCIÓN DE PRECIPITADOS EN FeNiCoAlTiB MEDIANTE LA TÉCNICA DE SAXS

J. Orso^{a,b*}, M.F. Giordana^{a,c}, J Dawidowski^{b,c}, F. Herrera^b, F. Pschunder^b, C. Sobrero^{a,c}

^a Universidad Nacional de Rosario

^b Comisión Nacional de Energía Atómica

^c Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

*orso@fceia.unr.edu.ar

Palabras claves: ALEACIÓN CON MEMORIA DE FORMA; PRECIPITADOS; SAXS

En este trabajo se analizó el comportamiento de precipitados en Fe–30Ni–15Co–10Al–2.5Ti–0.05B (at.%), que pertenecen a la familia de aleaciones con memoria de forma. El estudio se hizo mediante la técnica SAXS en el Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones (LAHN-CNEA). Se pudo determinar el tamaño y distancia media de los precipitados en el material, luego de haber sido sometido a distintos envejecidos. Para el análisis de los datos se utilizó el programa SASVIEW [1]

De los ajustes se obtuvieron los parámetros: radio de las esferas (r); radio efectivo (R_{HS}), que puede ser interpretado como un promedio de las distancias entre precipitados y fracción de volumen (ϕ) de los precipitados. Se pudo determinar un incremento del tamaño de los precipitados, y de la distancia entre ellos, en función de la temperatura y el tiempo.

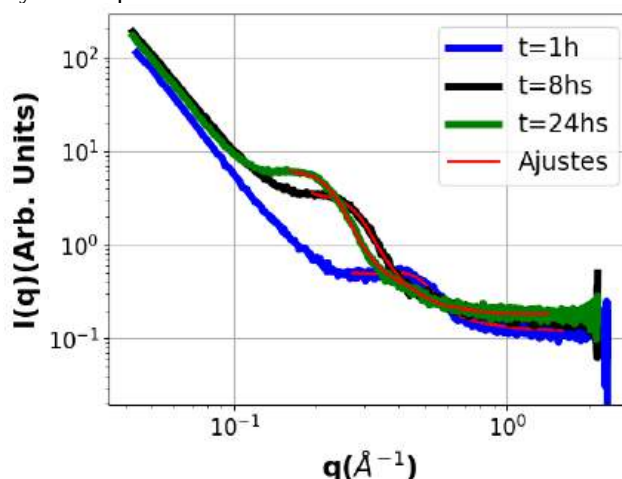


Figura 1. Curvas de I vs q para materia envejecido a $T=700^{\circ}\text{C}$ con diferentes tiempos de tratamiento

En la Figura 1 se pueden observar las curvas de $I(q)$ y los ajuste para un envejecido a $T=700^{\circ}\text{C}$, para diversos tiempos de tratamiento. Un análisis cualitativo que se desprende de esta figura es el corrimiento que se puede observar, hacía de izquierda, de los picos, que se corresponde con un aumento del tamaño de los precipitados y de las distancias medias entre ellos.

[1] M. Doucet et al. SasView Version 5.0.5, Zenodo, 10.5281/zenodo.6331344

**DIFRACTÓMETRO DE NEUTRONES DE ALTA RESOLUCIÓN PARA EL LABORATORIO
ARGENTINO DE HACES DE NEUTRONES****D.G. Franco^{a,b*}, M.A. Vicente Álvarez^{a,b}, J. Santisteban^{a,b}**^a Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones, CNEA, S. C. de Bariloche (RN), Argentina.^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET.

*diego.franco@cnea.gob.ar

Palabras claves: DIFRACTÓMETRO; NEUTRONES; RIETVELD; ALTA RESOLUCIÓN

El Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones (LAHN) se encuentra desarrollando e instalando distintos instrumentos de dispersión de neutrones para el estudio de la materia condensada asociados al Reactor Argentino Multipropósito RA-10, localizado en el Centro Atómico Ezeiza. Entre dichos instrumentos ya se encuentra en construcción el difractómetro multipropósito de alta intensidad ANDES (*Advanced Neutron Diffractometer for Engineering and Science*) [1, 2], el cual se encuentra optimizado para la determinación de tensiones internas. El mismo se localizará en el edificio del reactor a la salida del conducto de neutrones térmicos GT3 y permitirá realizar mediciones con muy alta intensidad sobre un rango angular reducido.

Un segundo difractómetro ha obtenido financiación a través de un BAPIN [3] y está proyectado en el hall de guías a la salida del conducto GT1f, con un flujo térmico de 10^9 n/cm² s y una sección transversal de 300 mm x 70 mm. Dicho instrumento estará optimizado para el análisis detallado de estructuras cristalinas, el cual se realiza usualmente mediante análisis Rietveld, y por lo tanto se diferenciará de ANDES en que estará diseñado como un difractómetro de neutrones de alta resolución, con un detector tipo banana sobre un amplio rango angular y muy bajo fondo.

En este trabajo presentaremos los requerimientos neutrónicos y funcionales identificados hasta el momento para dicho instrumento en base a los casos científicos de los años 2017 [4] y 2022 [5] planteados para el mismo, junto a consideraciones generales relativas al diseño de difractómetros de alta resolución en base a la experiencia reportada a nivel internacional. El trabajo se plantea como un llamado a la comunidad cristalográfica argentina, previo al inicio del diseño conceptual, para aportar nuevos requerimientos operacionales que aseguren un instrumento que dé respuesta a las necesidades esperadas para los próximos veinte años, en términos de análisis Rietveld usando datos de difracción de neutrones de alta resolución.

[1] J. Santisteban, A. Beceyro, Ingeniería conceptual de difractómetro de neutrones multipropósito para el reactor RA-10, IN-LAHN-002/0200, 2017.

[2] A. Beceyro Ferrán, Diseño conceptual y estimación de performance del difractómetro de neutrones ANDES para el estudio de muestras en polvo, Tesis de carrera de Maestría en Ingeniería, Instituto Balseiro – Universidad Nacional de Cuyo – Comisión Nacional de Energía Atómica, 2019.

[3] BAPIN 138907: Diseño y montaje e Implementación de 7 Instrumentos del Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones-CAE-Ezeiza-Provincia de Buenos Aires.

[4] L. Moggi, F. Napolitano, G. Aurelio (coordinadores), Caso Científico “Instrumento de difracción de polvos de alta resolución”, SC-LAHN-005, 2017.

[5] K. Pierpauli, J. Santisteban, R. Granada, J. Campo, G. J. Cuello, Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones “Técnicas neutrónicas para la ciencia argentina y latinoamericana”, Casos científicos presentados durante el III Congreso Argentino de Técnicas Neutrónicas, Comisión Nacional de Energía Atómica, ISBN 978-987-1323-87-6, 2023. <https://nuclea.cnea.gob.ar/handle/20.500.12553/4403>.



CATCHING COPPER NITRITE REDUCTASES IN ACTION. BIOPHYSICS AND MX APPROACHES

C.S. Ramírez^a, J.I. Puchol^a, J. Szuster^b, D.H. Murgida^b, M.G. Rivas^a, P.J. González^a, C.D. Brondino^a, C. Tolmie^c, D.J. Opperman^c, S.L. Rose^d, S.V. Antonyuk^d, S.S. Hasnain^d, **F.M. Ferroni^{a*}**

^aDepartamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas. Universidad Nacional del Litoral (UNL). CONICET. Santa Fe. Argentina. ^bDepartamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física and INQUIMAE (CONICET-UBA). Buenos Aires, Argentina. ^cDepartment of Microbiology and Biochemistry, University of the Free State (UFS). Bloemfontein, South Africa. ^dBarkla X-ray Laboratory of Biophysics, University of Liverpool, Liverpool, United Kingdom.

*fferroni@fbc.unl.edu.ar

Keywords: NIRK; X-RAY CRYSTALLOGRAPHY; MSOX; RESONANCE RAMAN; EPR REDOX TITRATION

Copper nitrite reductases (NirKs) are found in many types of microorganisms and are important for the nitrogen cycle [1]. The conversion of nitrite to nitric oxide involves the consumption of two protons and one electron through a proton-coupled electron transfer (PCET) process [2]. In the homotrimeric two-domain NirKs, two types of copper centers are required for the activity of the enzyme, one of type 1 (T1Cu), and the other of type 2 (T2Cu). T1Cu is an electron transfer (ET) center that is involved in inter- and intraprotein ET processes. T2Cu is the catalytic site where the proton-coupled nitrite reduction takes place. T1Cu is linked to T2Cu by the highly-conserved Cys–His bridge and by the so-called sensing loop [2]. The catalytic cycle involves the binding of nitrite to T2Cu, followed by its reduction by T1Cu, with the Cys–His bridge serving as an electron shuttle. The process is controlled by the sensing loop and involves two important amino acids, Asp_{CAT} and His_{CAT}, which are relevant to the process under discussion [2]. We were working with the two-domain NirKs derived from *Sinorhizobium meliloti* 2011 (SmNirK) [3] and *Bradyrhizobium japonicum* USDA110 (BjNirK) [4]. We have also discovered a novel three-domain NirK from *Thermus scotoductus* SA-01 (TsNirK) with an unusual T2Cu site [5].

Here, we present biophysical approaches (UV-vis spectroscopy, resonance Raman and EPR redox titration) for unveiling functional properties of the enzyme. These findings are then combined with those from macromolecular X-ray crystallography (MX) studies. A novel MX approach was implemented at Barkla X-ray Laboratory of Biophysics (UK) to catch the enzymes in action [6]. We captured intermediates of the catalytic cycle using a multiple structure from one single crystal (MSOX) method coupled with online UV-vis spectroscopy at the I24 beamline at the Diamond Light Source.

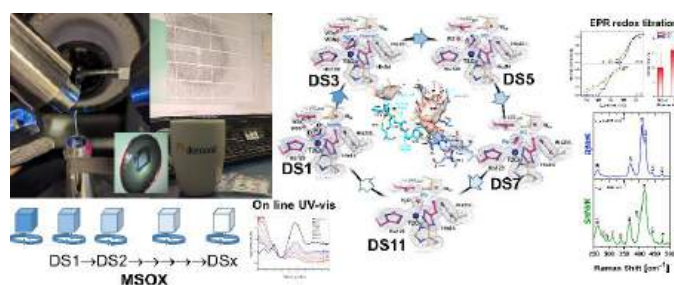


Figura 1. MSOX and biophysics approaches for studying NirKs.

- [1] X. Zhang, B.B. Ward, D.M. Sigman. Chem. Rev., 120 (2020) 5301–5351.
- [2] R.R. Eady, S.S. Hasnain. Coord. Chem. Rev., 460 (2022) 214463
- [3] C.S. Ramírez, C. Tolmie, D.J. Opperman, P.J. González, M.G. Rivas, C.D. Brondino, F.M. Ferroni. Protein Sci., 30 (2021) 2310–2323.
- [4] C.S. Ramírez, C. Tolmie, M.G. Rivas, P.J. González, D.J. Opperman, D.H. Murgida, C.D. Brondino, F.M. Ferroni. Arch. Biochem. Biophys., 770 (2025) 110467.
- [5] D.J. Opperman, D.H. Murgida, S.D. Dalosto, C.D. Brondino, F.M. Ferroni. IUCrJ, 6 (2019) 248–258.
- [6] S.L. Rose, F.M. Ferroni, S. Horrell, C.D. Brondino, R.R. Eady, S. Jaho, M.A. Hough, R.L. Owen, S.V. Antonyuk, S.S. Hasnain. J Mol. Biol., 436 (2024) 168706.

**SALES Y COCRISTALES IÓNICOS DE TARTRATO DE PREGABALINA****P. Gaztañaga*, E. Freire Espeleta^{a,b}, D.R. Vega^a**^a Departamento de Física de la materia condensada, Centro Atómico Constituyentes, G1yA, GAIDI, CNEA^b CONICET

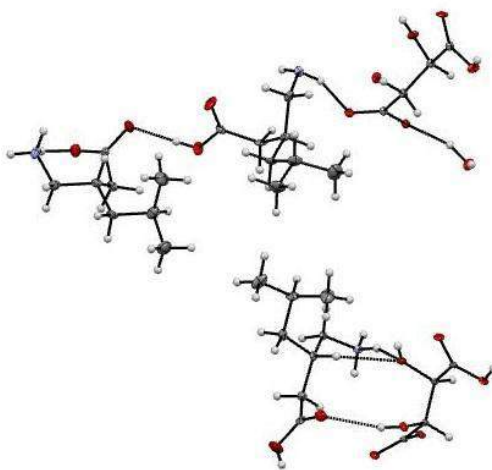
*pablogaztanaga@cnea.gob.ar

Palabras claves: DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL; PREGABALINA; COCRISTAL IÓNICO

Pregabalina es un ingrediente farmacéutico activo (IFA) derivado del ácido γ -aminobutírico que se utiliza en tratamientos de epilepsia, dolores neuropático y trastornos de la ansiedad [1]. Pregabalina es una molécula quiral, siendo el enantiómero S la molécula con actividad farmacológica. Uno de los pasos críticos en su producción es la separación enantiomérica de Pregabalina racémica. Este proceso se realiza típicamente generando sales de Pregabalina y L-Ácido Tartárico. Recientemente se ha estudiado esta sal hidratada en detalle y se ha propuesto un nuevo método de separación enantiomérica de mayor eficiencia a los previamente reportados [2].

Sin embargo, hasta el momento no se han publicado estructuras de Tartrato de Pregabalina en la base de datos cristalográficos de Cambridge [3]. En este trabajo presentamos la estructura cristalina del Tartrato de Pregabalina en su forma monohidratada y anhidro. Ambas estructuras cristalizan en el grupo espacial $P2_1$, con parámetros de red $a=7.4472(3)\text{\AA}$, $b=11.5249(5)\text{\AA}$, $c=9.6023(4)\text{\AA}$ y $\beta=98.111(2)^\circ$ en la estructura monohidratada y $a=7.2310(3)\text{\AA}$, $b=8.5261(4)\text{\AA}$, $c=12.3967(5)\text{\AA}$ y $\beta=91.831(2)^\circ$ en su forma anhidra.

Además, se ha demostrado la existencia y obtenido la estructura del cocrystal iónico con estequiometría Pregabalina 3: L-Ácido Tartárico 2: H_2O 1 donde 2 moléculas de Pregabalinas se encuentran protonadas y una tercera molécula se encuentra con carga neutra. Dicha estructura también cristaliza en el grupo $P2_1$ con parámetros de red $a=14.8415(11)\text{\AA}$, $b=7.1586(5)\text{\AA}$, $c=19.8118(15)\text{\AA}$ y $\beta=101.682(2)^\circ$.

Figura 1. Unidad asimétrica del cocrystal iónico de Pregabalina 3: L-Ácido Tartárico 2- H_2O 1

[1] R. Chunder, S. Afr. Pharm. J. 89(2) (2022) 16–19.

[2] M.H. Bosits, L. Bereczki, P. Bombicz, Z. Szalay, H. Pataki, Á. Demeter, CrystEngComm, 25 (2023) 641–652.



DETERMINATION OF ^{IV}B IN TOURMALINE-SUPERGROUP MINERALS BASED ON XRD ANALYSIS: PETROGENETIC IMPLICANCES

C.V. Giardino^a, J.C. Oyarzábal^{a*}

^a Instituto de Ciencias Polares, Ambiente y Recursos Naturales, Universidad Nacional de Tierra del Fuego

*joyarzabal@untdf.edu.ar

Keywords: ELBAITE; XRD; BORON; CRYSTALLIZATION TEMPERATURE; PRESSURE

A classification for tourmaline-supergroup minerals is based on the generalized structural formula $XY_3Z_6(T_6O_{18})(BO_3)_3V_3W$ [1]. All of them have a rhombohedral lattice ($R3m$) with $Z=3$ [2]. $T(Si^{4+}, Al^{3+}, B^{3+})$ -O tetrahedra form six-membered ditrigonal rings by sharing two oxygens each, defining these species as cyclosilicates. Y cations are octahedrally coordinated and share edges with Z octahedra. Three ^{III}B cations form BO_3 triangles perpendicular to the c-axis, each linked to Z and X polyhedral [2]. In alkali tourmalines, short $T-O$ (~ 1.611 Å) and $Z-O$ (~ 1.976 Å) bond lengths reflect enrichment in ^{VI}Al and excess ^{III}B , which may occupy the tetrahedral site as ^{IV}B . The amount of ^{IV}B increases with Al occupancy at the Z site, following an approximately linear–power relation up to $^{IV}B \approx Si \approx 3$ apfu and Y Al ≈ 3 apfu [3].

Elbaite specimens from the Yatasto-San Bernardo pegmatite (Conlara Pegmatite District, San Luis, Argentina) were sampled from an inner internal zone of this lithium-bearing deposit, and their cell parameters were calculated by powder XRD. The cell parameters for rubellite are: a 15.775(4) Å, c 7.087(1) Å, V 1527.18(4) Å³, with c/a 0.449; and for verdelite: a 15.768(3) Å, c 7.088(1) Å, V 1526.18(1) Å³ with c/a 0.450 [4]. The values of the cell parameters, especially V , can be used to estimate the boron hosted in tetrahedral coordination [3]. A plot of V (Å³) vs. ^{IV}B [3], shows an inverse correlation between ^{IV}B and unit-cell volume. According to this diagram, the studied samples contain values of $^{IV}B \sim 0.47$ apfu [4] (Fig. 1a).

^{IV}B increases with decreasing temperature and does not change significantly with pressure at a given temperature. Typical Al-Li-bearing-tourmalines, contain amounts of ≤ 0.40 ^{IV}B apfu, suggesting pressures ≤ 300 MPa for such Li-bearing pegmatites [3] (Fig. 1b). According to those authors, tourmalines with crystalline structures similar to those determined in the Yatasto-San Bernardo pegmatite samples would have formed at approximately ~ 290 MPa and 500 °C. This range corresponds to the crystallization environment characteristic of rare-element class pegmatites, complex type, spodumene subtype [4].

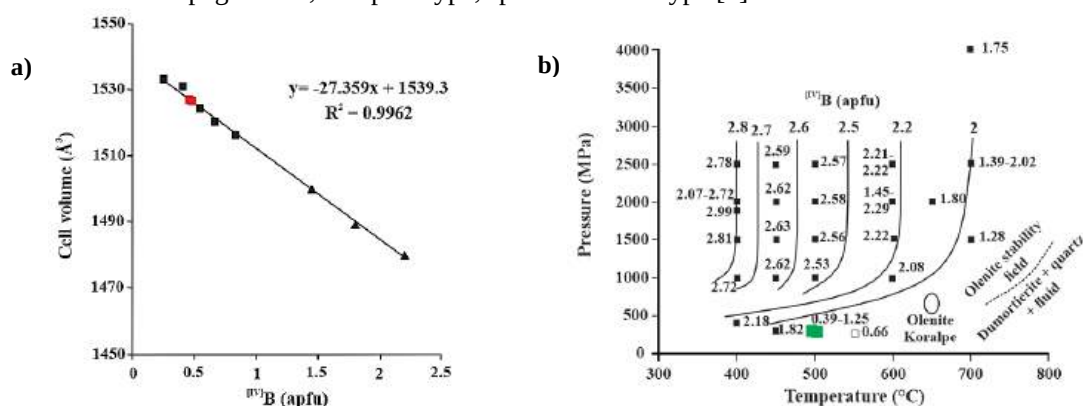


Figure 1a. ^{IV}B vs. V for natural (squares) and synthetic (triangles) Al-B rich tourmalines [3], Yatasto-San Bernardo elbaite are plotted as red squares. 1b. ^{IV}B according to P-T conditions [3], samples studied in this work are plotted as green squares.

[1] D.J. Darrell, M. Movák, F.C. Hawthorne, A. Ertl, B.L. Dutrow, P. Uher, F. Pezzotta, *Am. Min.*, 96 (2011) 895–913.

[2] W.A. Deer, R.A. Howie, J. Zussman, *Rock-Forming Minerals*, Min. Soc. London, 498p. London 2013.

[3] A. Ertl, E. Tillmanns, T. Ntaflos, C. Francis, G. Giester, W. Körner, J.M. Hughes, C. Lengauer, M. Prem, *Eur. J. Min.*, 20 (2008) 881–888.

[4] C.V. Giardino, Trabajo Final de Tesis Licenciatura ICPA-UNTDF, 2024, unpublished, 122p.

A stylized illustration featuring a rainbow with yellow and orange bands arching over a range of blue, geometric mountains. The mountains are composed of various shades of blue and white, creating a faceted, crystalline appearance. The entire scene is set against a light blue background with a subtle geometric pattern of triangles and lines in the corners.

Contribuciones Murales



VALORIZACIÓN DEL SILICIO RECICLADO DE PANELES SOLARES PARA SINTETIZAR PSEUDOWOLLASTONITA DE ALTA BLANCURA

L.I. Barbosa^{a*}, O.C. Barrios^a, R.P. Orosco^b

^a INTEQUI (CONICET-UNSL)-Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Almirante Brown 1455, D5700 San Luis, Argentina.

^b CIDMEJu-Universidad Nacional de Jujuy, Juan A. Rojas esq. San Martín, 4612 Palpalá, Jujuy, Argentina

*lbarbosa@unsl.edu.ar

Palabras claves: WOLLASTONITA; PSEUDOWOLLASTONITA; SILICIO RECICLADO; RESIDUOS FOTOVOLTAICOS; HALOSILICATOS DE CALCIO

La expansión global de la energía solar anticipa cerca de 78 millones de toneladas de residuos fotovoltaicos hacia 2050, lo que plantea la necesidad de estrategias de valorización del silicio reciclado. Este trabajo explora su uso en la síntesis de wollastonita (CaSiO_3) y pseudowollastonita, que se emplean como cargas cerámicas, aditivos en plásticos y sustitutos del asbesto. Se usó silicio metálico recuperado de paneles solares y $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ en la síntesis CaSiO_3 . Además, se estudió el efecto del agregado de Li_2CO_3 . Se realizaron calcinaciones a 700, 800 y 900 °C, caracterización por difracción de rayos X (DRX) y medidas de blancura (L^*). A 700 °C, la mezcla originó principalmente $\text{Ca}_2\text{SiO}_3\text{Cl}_2$ (halosilicato de calcio) y cuarzo (SiO_2). A 800 °C, surgieron fases cloradas intermedias como $\text{Ca}_{10}\text{Si}_6\text{O}_{21}\text{Cl}_2$ y polimorfos de wollastonita: parawollastonita (estructura monoclinica $\text{P2}_1/\text{a}$, cadenas simples de SiO_4) y pseudowollastonita (C2/c , anillos de Si_3O_9 , apilamiento ordenado en cuatro capas) [1]. A 900 °C, la pseudowollastonita se convirtió en la fase predominante, aunque se detectó larnita (Ca_2SiO_4) como fase secundaria indeseada que disminuye la blancura. Con Li_2CO_3 , la cristalización se modificó: a 800 °C se observaron solo $\text{Ca}_{10}\text{Si}_6\text{O}_{21}\text{Cl}_2$ y pseudowollastonita, y a 900 °C la pseudowollastonita se estabilizó como fase única, sin larnita (Fig. 1). El análisis de blancura (L^*) corroboró la correlación entre fases y propiedades ópticas: los valores aumentaron de 51,16 (700 °C) a 78,99 (800 °C) y 74,85 (900 °C) sin litio, alcanzando 82,94 a 900 °C con litio, próximo al estándar comercial ($\approx 93,6$). Así, Li_2CO_3 estabiliza la simetría C2/c , promoviendo el orden estructural. El trabajo demuestra que $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ facilita la formación de halosilicatos intermedios que promueven la cristalización de pseudowollastonita a temperaturas relativamente bajas, y que Li_2CO_3 actúa como mineralizador suprimiendo fases indeseadas. La estrategia valida la valorización de silicio reciclado en la producción de materiales cerámicos de alto valor agregado, contribuyendo a la economía circular.

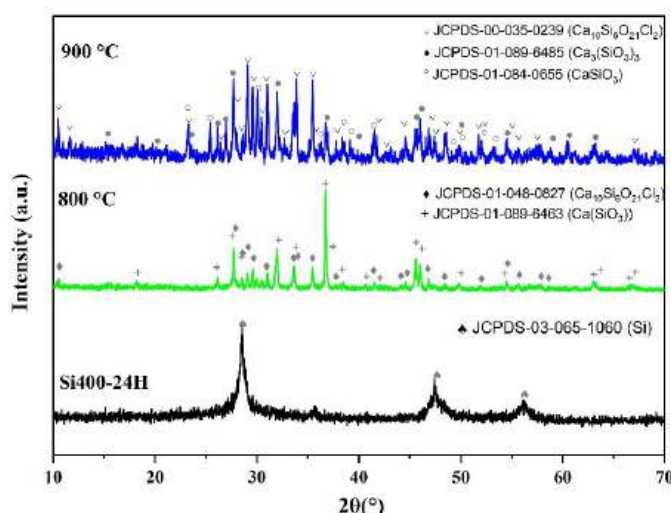


Figura 1. Difractograma de la mezcla $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}/\text{Si}$ calcinada en aire con agregado de Li_2CO_3 .

[1] F.A. Abdul Azam, R. Shamsudin, M.H. Ng, Z. Zainuddin, M.A. Abdul Hamid, R. Abd Rashid, Int. J. Cur. Res. Eng. Sci. Tech., 1(S1) (2018) 313–318.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ESPINELAS LiMn_2O_4 A PARTIR DE Li_2CO_3 RECICLADO DE BATERÍAS DE ION LITIO

O.C. Barrios^{a*}, C.A. López^a, M.E. Saleta^b

^aInstituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI) y Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia (FQByF-UNSL) A. Brown 1455, San Luis, Argentina.

^bInstituto de Nanociencia y Nanotecnología (INN), CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche, e Instituto Balseiro, U.N. Cuyo y CNEA, S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

*ocbarrios@unsl.edu.ar

Palabras claves: SÍNTESIS DE MATERIALES; BATERÍAS ION LITIO; DOPAJE; METALES

La producción masiva de baterías de ion litio (LIBs), impulsada por la expansión de dispositivos electrónicos y vehículos eléctricos, ha generado un incremento significativo en la cantidad de residuos, planteando serios desafíos ambientales y económicos [1]. En particular, los materiales basados en LiMn_2O_4 (LMO) resultan atractivos por su bajo costo y abundancia, aunque presentan problemas asociados a su degradación y a la liberación de manganeso, lo que motiva el desarrollo de estrategias de reciclado y reutilización más sostenibles [2]. En este contexto, surge la necesidad de explorar rutas alternativas que integren principios de economía circular y permitan la obtención de nuevos materiales funcionales con valor agregado.

En este trabajo se propone la síntesis de materiales derivados de la espinela LMO a partir de Li_2CO_3 obtenido de baterías recicladas, utilizando la cantidad estequiométrica y excesos del 10 y 20 % de litio, con el fin de explorar su estabilidad estructural y el comportamiento redox de $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$. La síntesis se realizó por molienda de alta energía y un posterior tratamiento térmico. Se observó que la formación de fases espinela comienza a 600 °C; sin embargo, un tratamiento a 700 °C mejora notablemente la cristalinidad. Los refinamientos Rietveld de los patrones de difracción de rayos X (DRX) confirmaron la estructura espinela cúbica (GE: $\text{Fd}\bar{3}m$) y mostraron que la adición de Li_2CO_3 en exceso (10 y 20 %) no induce la formación de impurezas y produce una leve reducción del tamaño de celda (Figura 1). Además, las muestras se estudiaron morfológicamente por microscopía electrónica de barrido (SEM) y transmisión (TEM).

Por último, el comportamiento redox $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$ fue estudiado mediante espectroscopía de resonancia paramagnética electrónica (EPR). Este análisis evidenció que el exceso de litio induce un aumento relativo de la fracción de Mn^{4+} acompañado de una disminución de Mn^{3+} , reflejado en el incremento de la señal (Figura 1c). Estos resultados muestran que la incorporación de litio adicional favorece la estabilidad estructural al mitigar las distorsiones asociadas al efecto Jahn-Teller, lo que podrá mejorar el desempeño electroquímico de estos materiales como cátodos en LIBs.

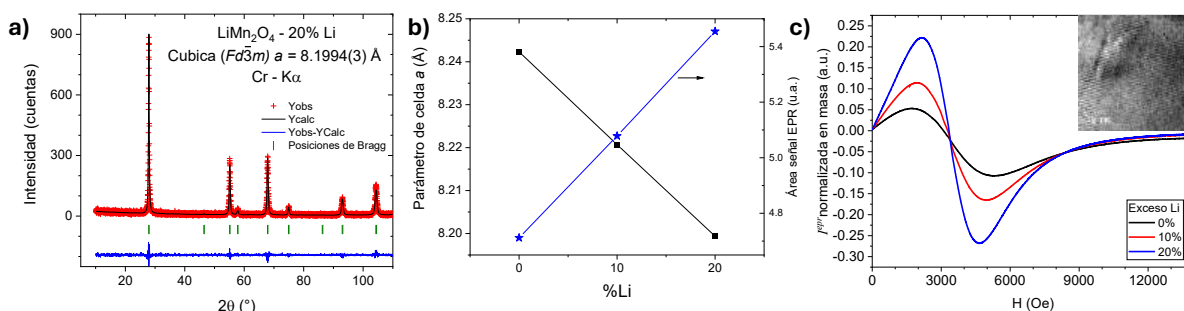


Figura 1. a) Refinamiento Rietveld, b) Parámetro de celda y área de señal EPR vs %Li, c) Espectros EPR a temperatura ambiente. Inset Micrografía TEM 10% Li.

[1] Z. Hu, G. Yang, X. Li, P. Kong, M. Zhen, B. Shen, J. Energy Storage, 134 (2025) 118099.

[2] G. Tian, J. Gao, S. Yan, H. Wang, R. Li, J. Xiang, W. Du, L. Zhang, N. Tang, Desalination, 592 (2024) 118103.



MODELADO DE LA ESTRUCTURA DE HIDROXIAPATITAS DE CALCIO DOPADAS CON ESTRONCIO

A.E. Bianchi^{1,2*}, J.R. Guerra-López^{3,4}, M. Ubertino⁴, M. Ramos⁴, J.A. Güida^{3,4,5}, V. Ferraresi Curotto¹, L. Junciel¹, J. Rau⁷ y G.A. Echeverría^{1,2}

1-IFLP, CCT-La Plata (CONICET)

2-Depto de Ciencias Básicas (FI, UNLP) 115 y 49. 115 y 49- 1900 La Plata. Argentina.

3-Departamento de Básicas, Universidad Nacional de Luján, rutas 5 y 7, CC 6700, Luján, Argentina.

4-Instituto de Ecología y Desarrollo Sustentable (INEDES, CONICET-UNLu), 6700 Luján, Buenos Aires, Argentina

5- CEQUINOR (CCT-La Plata), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 1900, La Plata, Argentina.

6- Istituto di Struttura della Materia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, ISM-CNR, Via del Fosso del Cavaliere 100, 00133 Roma, Italy.

*bianchi@fisica.unlp.edu.ar

Palabras claves: HIDROXIAPATITAS; DRX; IR; RIETVELD

En la actualidad la hidroxiapatita de calcio (CaHap), debido a sus propiedades de bioactividad y biocompatibilidad tisular, continúa siendo uno de los materiales más empleados en la reparación del tejido óseo. [1]. No obstante, la aplicación presenta algunas dificultades; entre ellas, su baja reabsorción en la zona de implante, hecho que limita su uso en ortopedia. Con el objetivo de mejorar las propiedades osteointegradoras de las hidroxiapatitas de calcio (CaHap) hemos sintetizado y caracterizado diversas apatitas sustituyendo Ca(II) por Sr(II). Dicho reemplazo resulta particularmente relevante dado que ambos cationes son muy abundantes en los sistemas biológicos [1,2]. Diferentes estudios han demostrado que cuando se incorpora a la hidroxiapatita, el Sr (II) estimula la actividad de los osteoblastos y ejerce su efecto inhibidor sobre la proliferación de osteoclastos [3]. En este trabajo, se analizará, a partir de datos de difracción de rayos X de polvos (DRX) empleando el análisis de Rietveld, las estructuras de apatitas puras y sustituidas con Sr(II), sintetizadas por un método desarrollado en nuestro laboratorio, a partir de las variaciones realizadas al método reportado por Gibson and Bonfield [4], su estabilidad en función de cantidad de Sr sustituido en la estructura [(Sr,Ca)Hap]. A partir de estudios previos hemos determinado que la CaHap cristaliza en la fase hexagonal (grupo espacial $P6_3/m$). En particular nos interesa explorar la posible influencia del tamaño de grano y microesfuerzos (isotrópico o anisotrópico) en los patrones DRX de CaHap sustituidas con distintos porcentajes de Sr, así como su estabilidad en función de la cantidad de Sr incorporado en la estructura [(Sr,Ca)Hap]. Los resultados obtenidos serán contrastados con estudios previos realizados sobre hidroxiapatitas dopadas con Zn, en los que se observó la presencia de la fase apatítica hasta concentraciones de Zn(II) de aproximadamente 6 %wt, en el que la incorporación de agua es inferior a lo reportado hasta el momento en la literatura [5]. Estudios térmicos y cristalográficos mostraron que esta fase puede ser lo suficiente estable como para permitir la obtención de una cerámica en forma de apatita pura dopada con zinc que no presenta fase β -TCP. Estos estudios se completarán con el análisis por espectroscopia infrarroja, el cual nos brindará información sobre el grado de absorción de agua y CO₂ en la estructura estudiada. Por último, las propiedades eléctricas de las biocerámicas de fosfatos de calcio pueden influir en la cristalización de apatita biológica, en la adsorción de iones y proteínas, así como en la actividad celular, favoreciendo la bioactividad, el crecimiento óseo y la integración de implantes. En el presente trabajo se propone caracterizar las muestras mediante espectroscopia de impedancias (EI) en el rango de frecuencias entre 1Hz y 1MHz.

[1] S V. Dorozhkin, Biomaterials, 31 (2010) 1465–1485.

[2] S V. Dorozhkin, Coatings, 12 (2022) 1380.

[3] J. Caverzasio, Bone, 42(6) (2008) 1131–1136.

[4] J.R. Guerra-López, A.E. Bianchi, M.A. Ramos, V. Ferraresi-Curotto, J.A. Güida, G.A. Echeverría, Physica B: Condensed Matter 676 (2024) 415676.

[5] J.R. Guerra-Lopez, A.E. Bianchi, M.A. Ramos, M. Ubertino, V. Ferraresi-Curotto, J.A. Guida, K. Barbaro, A.A. Zhukova, V.Y. Grigorieva, J.V. Rau, J. Funct. Biomater. 16 (2025) 88.

**INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA DE SINTERIZACIÓN EN LAS PROPIEDADES DE
CERÁMICAS KNN–NCF****J. Camargo^{a*}, J.D. Madrigal^a, L. Ramajo^a, M. Castro^a**^a Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, INTEMA, Av. Colón 10850, 7600, Mar del Plata, Argentina

*jcamargo@fi.mdp.edu.ar

Palabras claves: COMPUESTOS CERÁMICOS; MAGNÉTICO; PIEZOELÉCTRICO

Los materiales magnetoeléctricos presentan un acoplamiento entre propiedades magnéticas y eléctricas. Sin embargo, este comportamiento suele ser débil a temperatura ambiente en los materiales magnetoeléctricos monofásicos comúnmente estudiados [1]. Para abordar esta limitación, los materiales compuestos que combinan un material piezoeléctrico con uno magnético ofrecen una solución prometedora [2–3]. Por ello, este trabajo se centra en la síntesis y optimización de las propiedades magnetoeléctricas de cerámicas que combinan fases magnéticas y piezoeléctricas con la composición $0,7\text{K}_{0,5}\text{Na}_{0,5}\text{NbO}_3\text{--}0,3\text{Ni}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (KNN–NCF).

Para obtener la fase ferrita NCF, se activaron mecánicamente acetato de cobalto, acetato de níquel y hematita en un medio alcohólico durante 3 horas utilizando un molino planetario. El polvo resultante se calcinó a 1050 °C durante 2 horas. Para la fase piezoeléctrica KNN, se activaron mecánicamente óxido de niobio, carbonato de sodio y carbonato de potasio durante 3 horas en un molino planetario. El polvo obtenido se trató térmicamente a 700 °C durante 2 horas. Ambos polvos calcinados se mezclaron, según la proporción en peso 0,7KNN–0,3NCF, en un molino planetario durante 1,5 horas. La mezcla se prensó uniaxialmente en forma de discos y se sinterizó a temperaturas entre 1075 y 1150 °C durante 2 horas.

Las muestras obtenidas se caracterizaron mediante difracción de rayos X (DRX), espectroscopía Raman y microscopía electrónica de barrido (MEB). Además, la densidad de las muestras se midió mediante el método de Arquímedes. Para evaluar las propiedades funcionales, se aplicaron electrodos de plata en las caras plano-paralelas, y se midieron las propiedades dieléctricas en el rango de temperatura de 25 a 500 °C. Finalmente, se determinaron la histéresis magnética y el coeficiente magnetoeléctrico de las muestras sinterizadas.

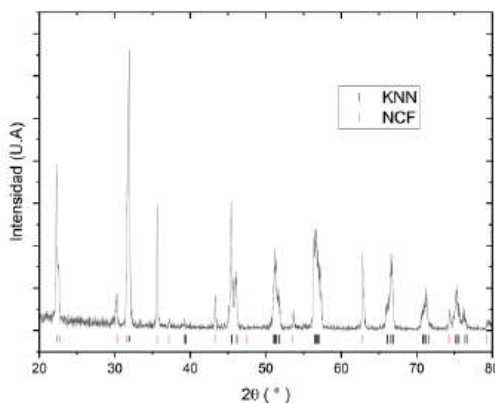


Figura 1. Patrón de difracción de rayos X (DRX) de muestras sinterizadas a 1075 °C durante 2 h.

A partir del difractograma del compuesto se confirmó la formación de las estructuras perovskita y espinela, correspondientes a las fases KNN y NCF, respectivamente. A partir de los valores del coeficiente magnetoeléctrico, se determinó la temperatura óptima de tratamiento térmico. Asimismo, con base en estos resultados, se plantea continuar el estudio de las propiedades funcionales en distintas proporciones de las fases piezoeléctrica y magnetostrictiva.

[1] X. Liang, H. Chen, N.X. Sun, APL Mater. 9 (2021) 041114.

[2] Y. Zhou, J. Zhang, B. Li, Y. Su, B. Kang, S. Cao, Curr. Appl. Phys. 11 (2011) S232–S235

[3] F. Wang, X. Liu, J. Ma, B. Wu, T. Wang, W. Wu, M. Chen, Ceram. Int. 48 (2022) 27472–27478.



EVALUACIÓN DE LA INCORPORACIÓN DE LITIO EN CARNALITAS $\text{KMgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$: RESULTADOS EXPERIMENTALES Y TEÓRICOS

N.L. Chiaramonte^{1*}, M.C. Blanco¹, M.G. García^{1,2}, G. Lener^{1,3}, D.A. Vega^{1,4}, F. Colombo^{1,2}

¹ Centro de Investigaciones en Ciencias de la Tierra, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas-Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

² Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

³ Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

⁴ Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur.

*nati.chiaramonte@gmail.com

Palabras claves: CARNALITA; LITIO; XPS; SÍNTESIS; DFT

El mineral carnalita, $\text{KMgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, precipita en algunos salares y piletas de evaporación a partir de salmueras cloruradas magnésicas, presentes en plantas de recuperación de litio (Li) [1]. Dado que se conoce un análogo sintético del Li (Li-carnalita), $(\text{LiH}_2\text{O})\text{MgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ [2], resulta de interés evaluar si el Li puede sustituir al potasio (K) en la estructura de la carnalita, y en qué proporciones, actuando así como un posible sumidero de Li, bajo condiciones relevantes para las salmueras del Altiplano-Puna de Sudamérica, una de las principales regiones productoras de Li a nivel mundial.

Con el objetivo de evaluar la incorporación de Li en la estructura de las carnalitas, se realizaron ensayos de síntesis mineral a partir de soluciones acuosas de LiCl , KCl y $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, manteniendo constante la proporción de Mg y variando progresivamente la concentración de Li. Se trabajó con relaciones molares K:Li de 10:0, 8:2, 6:4, 4:6, 2:8 y 0:10. Los ensayos se llevaron a cabo a temperatura ambiente ($\sim 20^\circ\text{C}$), y los sólidos obtenidos fueron caracterizados mediante difracción de rayos X (polvo y monocristal), ICP-OES, MEB/EDS y espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS). Adicionalmente, se realizaron cálculos de Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para modelar la posible incorporación de Li en la estructura cristalina de dicho mineral.

Los valores preliminares indican que el contenido máximo de Li que puede incorporarse en la estructura de la carnalita es de aproximadamente 0,32 % en peso, independientemente de la relación molar Li/K de la solución. El refinamiento estructural de monocristales, a partir de datos recolectados a 100 K y 150 K, muestra que la carnalita no experimenta transiciones de fase a bajas temperaturas. Según los cálculos DFT, el Li reemplaza al K en el sitio K(2), ingresando como una unidad $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})^+$. El litio se encuentra tetraédricamente coordinado por tres átomos de Cl_1 y uno de O_2 , mientras que los dos protones de la molécula de H_2O forman enlaces de hidrógeno con dos átomos de Cl. Esta disposición estructural coincide con la observada en la carnalita de Li sintética. La incorporación de $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})^+$ produce una expansión de la celda unidad y un cambio de simetría a triclinica (al menos a escala de celda unidad). Los espectros XPS muestran que la carnalita se descompone en alto vacío, pero sugieren que el Li no ingresa en ninguno de los sitios ocupados por Mg.

Además de poseer un campo de estabilidad relativamente restringido [3], la formación natural de la “Li-carnalita” parece estar limitada a condiciones en las que tanto el Mg como el Li se encuentren presentes en concentraciones elevadas. Su ocurrencia natural podría restringirse a inclusiones fluidas o en salmueras.

A partir de los resultados obtenidos, se puede inferir que la carnalita no constituye un sumidero significativo de litio, a menos que precipite en grandes cantidades. Su estabilidad a bajas temperaturas sugiere una posible detección en materiales extraterrestres, aunque su fuerte tendencia a deshidratarse limita su preservación a bajas presiones.

[1] J.J. Pueyo, G. Chong, C. Ayora, Chem. Geol., 466 (2017), 173–186.

[2] H. Schmidt, B. Euler, W. Voigt, G. Heide, Acta Crystallogr. Sect. C, 65 (9) (2009), i57–i59.

[3] H. Pöhlmann, U. König, Minerals, 11 (10) (2021), 1058.

**INFLUENCIA DEL DOPAJE CON Er^{3+} Y Gd^{3+} EN LA ÓPTICA Y LA ESTRUCTURA
CRISTALINA DE PELÍCULAS DELGADAS DE TiO_2** M. Sequeira^a, S. Conconi^{ab*}, G. Suarez^{ab}, M.R. Tejerina^a^a Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica CETMIC (CICPBA-CONICET -UNLP) Cno., Centenario y 506 Gonnet, La Plata 1897, Argentina.^b Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 47 y 115, La Plata 1900, Argentina.

*msconconi@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras claves: FILMS; TITANIO, LANTÁNIDOS

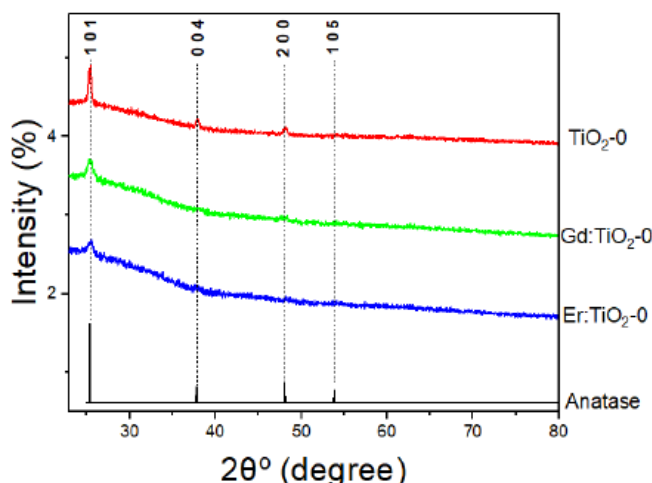
El dióxido de titanio (TiO_2) es un semiconductor ampliamente estudiado por su estabilidad química y potencial fotocatalítico, especialmente en su fase anatasa. Su eficiencia puede mejorarse mediante dopaje con iones de tierras raras como Er^{3+} y Gd^{3+} , que introducen niveles energéticos favorables para la separación de cargas y la absorción de luz visible, aunque un exceso de dopante como Gd puede inducir la formación de fase rutilo y disminuir la actividad fotocatalítica [1].

En este estudio se investigan los efectos estructurales del dopaje con tierras raras sobre películas delgadas de TiO_2 sintetizadas mediante dip-coating. Se compararon muestras sin dopar (TiO_2) con muestras dopadas con Er^{3+} ($\text{Er}:\text{TiO}_2$) y Gd^{3+} ($\text{Gd}:\text{TiO}_2$), todas sometidas a un recocido térmico en aire a 500 °C. La molaridad del Er^{3+} es de 0,006 M, mientras que la del Gd^{3+} es de 0,050 M. El análisis por difracción de rayos X (DRX) confirmó la presencia exclusiva de la fase anatasa en todas las muestras, sin formación de fases secundarias, lo que indica una incorporación exitosa de los dopantes en la red de TiO_2 .

Los parámetros de red calculados evidenciaron una mínima disminución del volumen de celda en las muestras dopadas respecto al TiO_2 puro. Estos cambios se atribuyen a la formación de vacantes de oxígeno y tensiones internas en la red cristalina generadas por los iones dopantes. [2]

Se analizaron también las modificaciones texturales de las películas obtenidas.

En conjunto, los resultados demuestran que el dopaje con tierras raras modifica la estructura cristalina del TiO_2 sin comprometer la estabilidad de la fase anatasa, aportando información relevante para el diseño de materiales funcionales basados en TiO_2 .

Figura 1. Difractogramas de las películas de TiO_2 , $\text{Gd}:\text{TiO}_2$ y $\text{Er}:\text{TiO}_2$.

[1] C. Cheng, J. Zhang, Y. Zhang, X. Du, X. Han, X. Wang, Thin Solid Films, 615 (2016) 427–433.

[2] M. Kayani, M. U. Khan, S. Riaz, A. Naseem, M. Usman, RSC Adv., 8 (2018) 22541–22552.



ESTUDIOS ESTRUCTURALES DE ESPINELAS DE Li Y Mn Y SU APLICACIÓN EN LA CAPTURA SELECTIVA DE LITIO

M. Gamba^{a,b}, T. Costa^b, S. Conconi^{a*}, F. Jeschull^b

^a Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC), Cno. Parque Centenario 2499-2599, Gonnet, Buenos Aires, Argentina

^b Instituto Tecnológico de Karlsruhe, Instituto de Materiales Aplicados - Sistemas de Almacenamiento de Energía (KIT IAM-ESS), Hermann-von-Helmholtz-Platz, 1, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Alemania

*msconconi@cetmic.unlp.edu.ar

Palabras claves: ESPINELAS; RECUBRIMIENTOS; CAPURA DE LITIO

El incremento en la demanda mundial de litio, junto con las consecuencias ambientales del método evaporítico tradicional, ha impulsado el desarrollo de tecnologías alternativas para su obtención que reduzcan el consumo de agua y permitan aprovechar otras fuentes naturales, como las salmueras geotérmicas. A diferencia de los estanques de evaporación al aire libre empleados en el triángulo del litio de Sudamérica, las tecnologías de extracción directa de litio (DLE) ofrecen procesos más eficientes y con menor impacto ambiental. Entre ellas, destacan el intercambio iónico y la adsorción específica mediante tamices de iones de litio (LIS) basados en óxidos de metales de transición, capaces de lograr altas tasas de recuperación, aunque con problemas de degradación por lixiviación e inestabilidad. En este contexto, el presente trabajo tiene como objetivo evaluar el uso de recubrimientos de LiNbO_3 en espinelas de litio y manganeso (de composición $\text{Li}_{1.6}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$) como estrategia para estabilizar su estructura cristalina y reducir la pérdida de manganeso durante la síntesis del adsorbente y su posterior uso en la captura de litio desde soluciones acuosas de LiCl . El hincapié estará puesto en los cambios estructurales generados durante las etapas de síntesis y posterior obtención del LIS, a través del análisis de los patrones de difracción de rayos X (DRX).

El material con composición $\text{Li}_{1.6}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$, confirmada mediante estudios elementales por espectroscopia de emisión óptica, se obtuvo mediante síntesis hidrotermal seguido de calcinación a 450 °C [1] y se denominó LMO. El análisis de XRD de los polvos reveló que, además de la fase espinela (sistema cúbico, grupo espacial $Fd-3m$), estaba presente una fracción de fase laminar Li_2MnO_3 (sistema monoclinico, grupo espacial $C2/m$). Posteriormente, el LMO fue recubierto con LiNbO_3 mediante una técnica desarrollada en KIT IAM-ESS [2] y sometido a una segunda etapa de calcinación. Se evaluaron diferentes niveles de recubrimiento (0,5; 1; 2,5 y 5 % p/p) y dos temperaturas de tratamiento térmico (450 y 600 °C). El material con 5 % de LiNbO_3 y calcinado a 600 °C presentó en DRX las reflexiones características a LiNbO_3 con simetría hexagonal y grupo espacial $R3c$. En cambio, las muestras con menor contenido de LiNbO_3 y/o tratadas a temperaturas inferiores no mostraron dichas reflexiones, probablemente por el límite de detección del equipo y/o un carácter amorfo. En una etapa posterior, los polvos fueron expuestos a un proceso de *acid pickling*, consistente en su tratamiento con HCl o ácido acético a 60 °C para intercambiar Li^+ por H^+ en la estructura y obtener así el tamiz iónico. El análisis por XRD de los productos, indicó que en todos los casos se preservó la fase espinela mientras que la fase laminar se disolvió en el tratamiento ácido (reflejándose en pérdidas de Mn de hasta 7% cuando se utilizó HCl). Además, el refinamiento de Rietveld reveló una disminución en los parámetros de celda tras el tratamiento ácido, consistente con el reemplazo de iones Li^+ por H^+ en la estructura cúbica. En las muestras tratadas con ácido acético sin recubrir, se formó además MnO_2 , mientras que las recubiertas con LiNbO_3 mantuvieron la simetría cúbica de la espinela, mostrando las ventajas de la presencia del coating. En este último grupo, la pérdida de Mn fue menor que en las tratadas con HCl (0,2%). Por último, la capacidad de absorción de litio en las condiciones estudiadas fue, en general, alta (8 mg/g) en comparación con publicaciones previas. Más aun, entre las muestras tratadas con ácido acético, se observó que la captura de Li en las muestras recubiertas fue mayor que en las no recubiertas. Esto sugiere que los LMO con niveles de recubrimiento del 0,5 o 1 % en peso son materiales prometedores para su uso con ácido acético en la etapa de acid pickling, ya que esta combinación permite una alta absorción de litio con una disolución mínima de Mn.

[1] L. Herrmann, H. Ehrenberg, M. Graczyk-Zajac, E. Kaymakci, T. Kölbl, L. Kölbl, L., J. Tübke. En. Adv. 1(11) (2022) 877–885

[2] V. Mereacre, P. Stüble, P., A. Ghamlouche, J.R. Binder. Nanomat. 11(2) (2021) 548.



ESTUDIO DEL SISTEMA Zr-Sn. APROXIMACIÓN TEÓRICA, NUMÉRICA Y EXPERIMENTAL

V.P. Ramunni^{a,b}, C. Corvalán Moya^{a,b,c*}, M.I. Pascuet^{a,b} y J.R. Fernández^{a,b,d}

^a Gerencia Materiales, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

^c Universidad Nacional de Tres de Febrero

^d Universidad Nacional de San Martín

*carolinacorvalan@cnea.gob.ar

Palabras claves: NUCLEAR; DIFUSION; SISTEMA ZrSn

Mejorar la eficiencia de los reactores nucleares continúa siendo un objetivo constante en el ámbito nuclear, tanto desde el aspecto de la mejora energética como asimismo del cuidado ambiental en la búsqueda de minimizar la cantidad de residuos generados; todo esto bajo estrictos controles de seguridad. En este contexto surge la iniciativa ATF (*Accident Tolerant Fuels*).

La iniciativa ATF contempla, entre otras cosas, mejoras en los materiales utilizados en los combustibles y/o en el diseño de los mismos. Las aleaciones de las vainas de elementos combustibles nucleares usadas en Argentina son base Zr con aleantes principales Sn o Nb, teniendo asimismo Fe como impureza. En este sentido, para entender y predecir las propiedades en servicio basadas en la evolución microestructural de la aleación, se vuelve de interés fundamental comprender procesos difusivos de sistemas binarios y ternarios involucrados en el material multialeado.

En el presente trabajo se calcularon los coeficientes de autodifusión y de difusión de solutos en el sistema ZrSn, utilizando el modelo de ocho frecuencias de Ghate [1] y el modelo de trece frecuencias desarrollado por Allnatt, Belova y Murch [2]. En particular, para el sistema Zr con trazador de Sn (fase hcp diluida), se investigaron tanto el límite de enlace fuerte como el límite de cinco frecuencias del modelo. Los cálculos se realizaron empleando un potencial de la literatura [3] mediante estática molecular clásica (EM), y la migración se calculó utilizando el método de “Nudged Elastic Band”, técnicas implementadas en el código LAMMPS [4], así como, a partir de cálculos iniciales dentro de la aproximación GGA (Generalized Gradient Approximation), empleando el código VASP [5] para garantizar la consistencia estructural. Se encontraron discrepancias en la autodifusión calculada de Zr y la difusión del Sn en la aleación hcp Zr-Sn. Los datos experimentales sobre la difusión de Sn en hcp-Zr son extremadamente escasos y antiguos, medidos por métodos indirectos [6]. En el presente trabajo se determinó un valor experimental de $5 (\pm 3) \times 10^{-18} \text{ m}^2/\text{s}$ a 750°C utilizando una geometría especial del par difusivo, seccionamiento por abrasión y mediciones LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscopy). Se destaca que este valor es muy cercano a los coeficientes de autodifusión experimentales en hcp-Zr puro.

Los resultados del presente trabajo muestran que el denominado modelo de cinco frecuencias —que excluye la disociación de pares y las frecuencias de salto anisotrópicas, y que requiere solo cinco frecuencias independientes— es suficiente para reproducir los coeficientes de difusión anisotrópicos del disolvente y del soluto, de acuerdo con los datos experimentales disponibles. Este estudio constituye un paso preliminar hacia la investigación del sistema ternario Zr-Sn-Fe, más complejo.

[1] P. Ghate, Phys. Rev. 133 (1964) A1167.

[2] A.R. Allnatt y A.B. Lidiard Atomic transport in solids; Cambridge University Press 1993.

[3] H. Mei, L. Chen, F. Wang, G. Liu, J. Hu, W. Lin, Y. Shen, J. Li, L. Kong. J. Nucl. Mater. 588 (2024) 154794.

[4] A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, W.M. Brown, P.S. Crozier, P.J. Veld, A. Kohlmeyer, S.G. Moore, T.D. Nguyen, R. Shan, M.J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S.J. Plimpton, Comp. Phys. Comm. 271 (2022) 10817.

[5] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54 (1996) 11169.

[6] P.L. Gruzin, Dokl. Akad. Nauk. S.S.S.R. 86 (1952) 289.



MAGNETISMO Y ESTRUCTURAS MAGNÉTICAS EN LOS COMPUESTOS NO CENTROSIMÉTRICOS RNi_3Ga_9 CON $\text{R} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$ Y Er

D. G. Franco^{a,b*}, R. Lora-Serrano^c, J. Duque^{c,d}, D. J. García^b

^a Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones, CNEA, S. C. de Bariloche (RN), Argentina.

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET, Argentina.

^c Universidade Federal de Uberlândia (UFU), Brasil.

^d Federal University of Sergipe, Brasil.

*diego.franco@cnea.gob.ar

Palabras claves: TIERRA RARA; MAGNETISMO; DIFRACCIÓN DE NEUTRONES; ESTRUCTURA MAGNÉTICA

Los compuestos basados en tierras raras poseen un amplio espectro de propiedades debido al distinto balance entre la interacción RKKY y el efecto Kondo. Nuevas y exóticas fases magnéticas han aparecido recientemente en sistemas en donde además es posible la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DM), la cual puede darse en sistemas no centrosimétricos. Dicha interacción estabiliza estructuras magnéticas con configuraciones de espín no colineales, como la red de *skyrmions* en MnSi en donde emergentes propiedades y funcionalidades han sido descriptas [1, 2].

Los intermetálicos RNi_3Ga_9 , con R una tierra rara, cristalizan en el grupo espacial R32, el cual no posee centro de simetría y por lo tanto se espera que existan interacciones de DM relevantes. Además, los iones R forman una red tipo panal de abejas en el plano *ab*. Un importante carácter magnético 2D es esperable dado que la distancia R-R a lo largo del eje *c* es bastante más grande que en el plano.

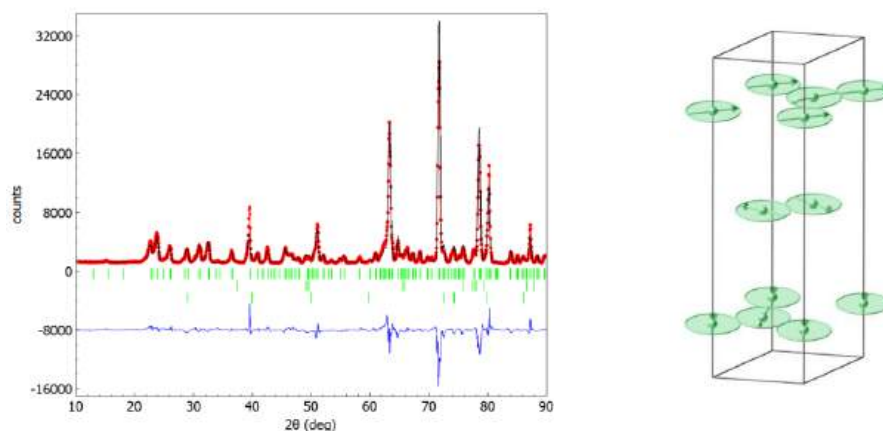


Figura 1. Izquierda: refinamiento Rietveld del patrón de difracción de neutrones de polvos a 1.6 K para HoNi_3Ga_9 teniendo en cuenta las fases estructural y magnética. Derecha: modelo magnético helicoidal obtenido, mostrando únicamente los iones de Ho con sus respectivos momentos magnéticos. La línea negra representa la celda unidad cristalina.

En este trabajo presentamos resultados de los compuestos RNi_3Ga_9 con $\text{R} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$ y Er , sintetizados por método de auto flujo. Presentaremos curvas de magnetización, de donde es posible inferir las temperaturas de orden y los distintos tipos de órdenes magnéticos, como así también datos de difracción de neutrones de polvos. El análisis de los picos magnéticos nos permite plantear distintos modelos magnéticos, obteniendo ordenamientos magnéticos de distinta índole según el ión R.

[1] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Böni, Science, 323 (2009) 915.

[2] N. Nagaosa, Y. Tokura, Nat. Nanotechnol. 8 (2013) 899.



MAGNETIC NANOCRYSTALS IN FENTON-LIKE PROCESSES ENHANCED BY NANOFIBRES: REAL-TIME OBSERVATION OF TETRACYCLINE DEGRADATION IN PIG MANURE WASTEWATER

V.G. Franco^{a,b,*}, B. Centro Elia^a, M.A. Morales^{a,c}, J. Fuentes García^a, G.F. Goya^{a,d}

^a Inst. Nanociencia y Materiales de Aragón, CSIC-Univ. de Zaragoza, Campus Río Ebro, 50018 Zaragoza, Spain

^b Facultad de Bioquímica, Universidad Nacional del Litoral, Ciudad Universitaria, 3000 Santa Fe, Argentina

^c Div. Resonancias Magnéticas, Centro Atómico de Bariloche/CONICET, S.C 8400, Bariloche, Argentina

^d Depto de Física de la Materia Condensada, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain

*vgfranco@fbc.unl.edu.ar

Keywords: NANOCRYSTALS; NANOFIBRES; TETRACYCLINE; DEGRADATION; ROS

This study presents a novel approach for the degradation of tetracycline (TC) in pig manure wastewater using magnetic nanofibres (MNF) based on magnetite nanocrystals as Fenton-like heterogeneous catalysts. The MNFs, composed of polyacrylonitrile (PAN) with embedded MnFe_2O_4 crystalline nanoparticles (Fig. 1), were synthesised by electrospinning and showed high stability and catalytic efficiency. The degradation process was driven by the formation of hydroxyl radicals ($\bullet\text{OH}$) through the activation of hydrogen peroxide (H_2O_2) on the surface of the MNFs. The results showed that TC was first adsorbed onto the MNFs before undergoing oxidation, and that the treatment efficiency increased with the concentration of H_2O_2 up to an optimum point, due to the increased removal of $\bullet\text{OH}$ by H_2O_2 . A heterogeneous dynamic kinetic model (DKM) was developed to describe the degradation mechanism, incorporating reactive oxygen species (ROS) generation, catalyst surface inactivation, and polymer stripping effects. Furthermore, the application of an alternating magnetic field significantly accelerated the reaction rate, likely due to localized heating effects. This study highlights the potential of MNFs as a scalable, reusable and efficient alternative for antibiotic-contaminated wastewater treatment, offering advantages over conventional homogeneous Fenton processes by minimizing iron sludge formation and broadening the operational pH range.

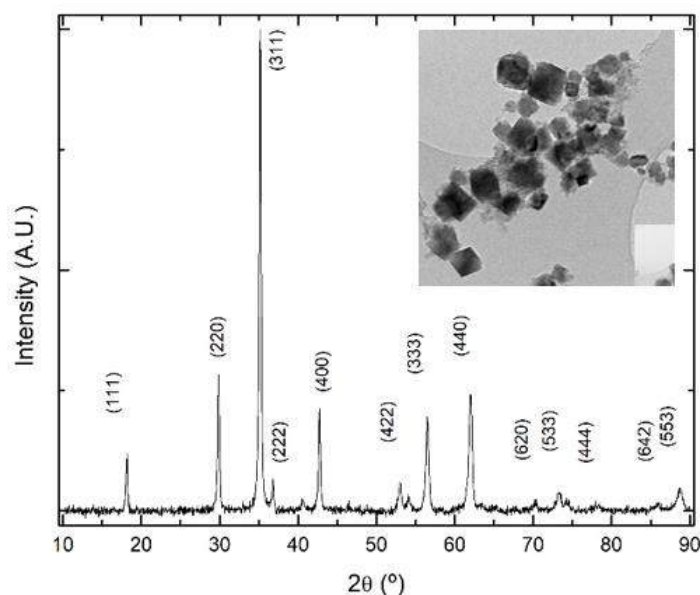


Figure 1. X-ray diffraction pattern from MNPs sample.

[1] A.C. Moreno Maldonado, E.L. Winkler, M. Raineri, A. Toro Córdova, L.M. Rodríguez, H.E. Troiani, M.L. Mojica Pisciotti, M.V. Mansilla, D. Tobia, M.S. Nadal, JPC C, 123 (33) (2019), 20617–20627.

[2] J.A. Fuentes-García, B. Sanz, R. Mallada, M.R. Ibarra, G.F. Goya, Mat. Des. 226 (2023), 111615.

[3] R. Ziegler, S. Ilyas, S. Mathur, G.F. Goya, J.A Fuentes-García, Fibers 12(6) (2024), 48.



CARACTERIZACIÓN DE CLORURO DE PLOMO OBTENIDO DE RELAVES MINEROS

M.N. Fuentes^{a*}, A.D. Escudero Acuña^b, J. González^b, G.D. Rosales^a, J. Andrade Gamboa^{cd}

^aLaboratorio de Innovación Abierta (INNOLAB), Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (CONICET-UNCUYO)

^bLaboratorio de Metalurgia Extractiva, Instituto de Tecnología Química (CONICET-UNSL)

^cCentro Atómico Bariloche (CNEA)

^dCentro Regional Universitarios Bariloche (UNComahue)

*fuentesmatias018@gmail.com

Palabras claves: PLOMO; COTUNITA; ORIENTACIÓN PREFERENCIAL

Los relaves mineros son subproductos del procesamiento de minerales y consisten en rocas finamente molidas, agua y materiales de ganga residuales. Estos materiales representan riesgos ambientales debido a su capacidad de generar drenaje ácido de mina (DAM), especialmente cuando fueron procesados minerales sulfurados. Estos reaccionan luego con el oxígeno atmosférico y el agua, alterando así el pH y contaminando los cuerpos de agua circundantes [1]. Estos relaves, a pesar de los problemas ambientales, constituyen una fuente secundaria de otros metales, dado que su tamaño de partícula fina elimina la necesidad de operaciones convencionales de trituración y molienda.

La mina La Estancia, ubicada en San Luis (Argentina), fue explotada por oro y plata desde mediados del siglo XIX hasta mediados del siglo XX. Actualmente, este sitio contiene relaves de granulometría fina con cantidades significativas de minerales portadores de plomo tales como, galena (PbS), anglesita (PbSO₄) y plumbojarosita Pb_{0,5}Fe₃(SO₄)₂(OH)₆.

En este trabajo, están siendo investigados diferentes procedimientos para recuperar plomo de estos relaves. Uno de ellos, consiste en la disolución selectiva de la anglesita, presente en el relave, en solución concentrada de cloruro de sodio (NaCl) en caliente, para la formación del complejo soluble [PbCl₄]²⁻. Separada la fracción soluble, se la dejó enfriar y se obtuvo PbCl₂ en su fase Cotunita con un buen grado de pureza y un alto porcentaje de recuperación; la solución remanente puede luego ser reutilizada.

Los cristales de cotunita (*Pnma*) fueron caracterización por difracción de rayos X ($a = 7,57 \text{ \AA}$, $b = 4,49 \text{ \AA}$, $c = 8,99 \text{ \AA}$) y microscopía óptica. Los cristales de cotunita obtenidos presentan un hábito acicular (fotografías), elongados según [001] y aplanados según {010}, esto marca una fuerte orientación preferencial como puede observarse en el difractograma de rayos X de la Figura 1. Los picos indexados muestran, en relación con las intensidades esperadas, que las reflexiones 060 y 020 se encuentran muy incrementadas. [2,3]

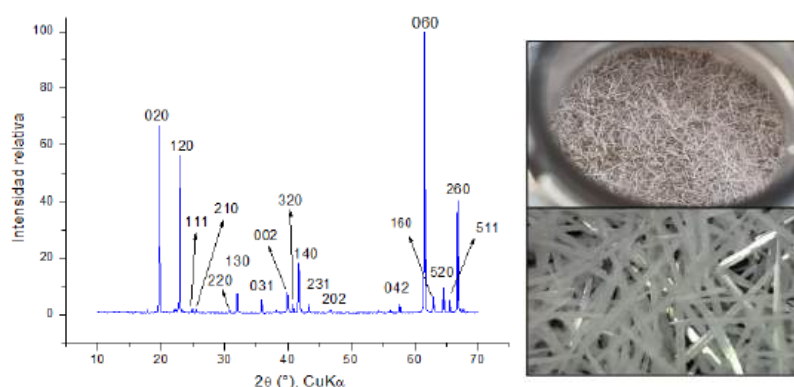


Figura 1. a) Difractograma del sólido precipitado; b) Fotografía de microscopio óptico

[1] C. García Ubaque, M. García Vaca, C. Agudelo Rodríguez. *Tecnura*, 18 (2014) 90–102.

[2] Cotunita. Mineral Data Publishing, version 1 (2001-2005). <https://rruff.geo.arizona.edu/doclib/hom/cotunnite.pdf>

[3] Powder Diffraction File #026-1150.



ESTUDIO DE MATERIALES DERIVADOS DE FELDESPÁTOS COMO FERTILIZANTES DE LIBERACIÓN LENTA DE POTASIO

J.I. Ramallo^{a,b,c}, M. Fuentes^{a,b*}, M.C. Fuertes^d, G.D. Rosales^{a,b}

^a Laboratorio de Innovación Abierta, Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (CONICET-FCEN UNCUYO), ^b Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UNCUYO), ^c Instituto Sabato (CNEA-UNSAM), ^d Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET).

*fuentesmatias018@gmail.com

Palabras claves: MICROCLINO; LEUCITA; LIXIVIACIÓN; DIFRACCIÓN DE POLVOS

Uno de los grandes problemas de la humanidad es la necesidad de aumentar la productividad agrícola para alimentar a una población de 9.800 millones de personas para 2050 [1]. Sin embargo, el uso excesivo de fertilizantes solubles provoca graves problemas, ya que suelen perderse a través de procesos como fotólisis, hidrólisis, lixiviación y degradación microbiana, lo que genera eutrofización de las aguas superficiales, contaminación de las aguas subterráneas y degradación del suelo [2]. Además, la deficiencia de K en las plantas produce un crecimiento deficiente y raíces subdesarrolladas [3]. En Argentina, existen áreas en las cuales se ha dado una disminución del contenido de K, y se esperan deficiencias generalizadas de potasio en los próximos 10 a 20 años, dependiendo del tipo de suelo y la tasa de extracción [4]. El 80% del potasio a nivel mundial se produce en Canadá, Rusia, Bielorrusia y China [6], y la totalidad de los productos de potasio en Argentina son importados [4] por lo cual es imprescindible el desarrollo de fertilizantes de origen nacional a fin de minimizar costos. En particular, el feldespato potásico (KAlSi_3O_8), presente en pegmatitas en la región de Cuyo [6], es altamente estable y difícil de descomponer mediante métodos convencionales [3]. Diversas técnicas han sido exploradas para extraer potasio soluble del feldespato. Sin embargo, estos métodos presentan limitaciones y producen sales de potasio solubles. Por ello, en este trabajo, se estudió la reacción entre el feldespato potásico y KF a bajas temperaturas para desarrollar un fertilizante de liberación lenta (FLL) de potasio. El seguimiento de la reacción fue realizado mediante fotometría de llama, difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido. Se observó la presencia de leucita (R040107) como una de las fases luego del tratamiento térmico. A su vez, esta leucita es susceptible de ser lixiviada con un ácido débil diluido como el ácido oxálico (Figura 1). Este comportamiento sugiere que la leucita sintetizada a partir del feldespato potásico constituye una fuente potencial de potasio de liberación lenta, capaz de suministrar gradualmente este nutriente esencial a los cultivos en condiciones controladas de disolución y puede ser utilizada como FLL.

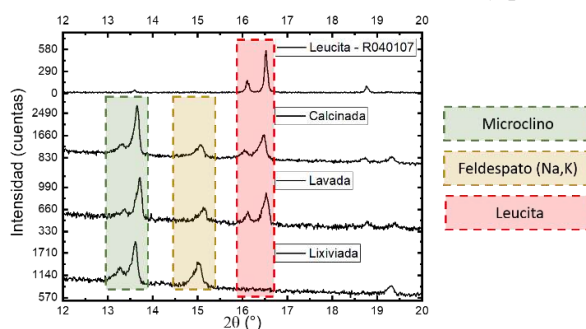


Figura 1. Difractogramas de feldespato calcinado con KF a 750 °C (calcinada), lavado con agua (lavada) y lixiviado con ácido oxálico (lixiviada).

[1] The future of food and agriculture – Trends and challenges. (2017), FAO: Rome.

[2] Seleiman, M.F., Almutairi, K.F., Alotaibi, M., et al., Plants, 10 (2021).

[3] Samantray, J., Anand, A., Dash, B., et al., Minerals Engineering 179 (2022) 107463.

[4] Informe potasio. (2019), Dirección Nacional de Promoción Minera: Argentina.

[5] <https://investingnews.com/daily/resource-investing/agriculture-investing/potash-investing/top-potash-countries-by-production/>, (2025).

[6] Wul, Petrología y potencial económico de las pegmatitas ubicadas al norte del batolito de Renca, provincia de San Luis, Argentina, Facultad de ciencias exactas y naturales. (2018), Universidad de Buenos Aires.



USO DE BIOPOLÍMEROS PARA LA DISPOSICIÓN DE UN MATERIAL PARA LA RETENCIÓN SELECTIVA DE Li

A. Gallinares^{1*}, V. Raimundi¹, M. Coustet¹, L. Mardones^{1,2}

¹ YPF Tecnología, Berisso, Provincia de Buenos Aires, Argentina

² Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET, Argentina

*agustina.gallinares@set.ypf.com

Palabras claves: LITIO; INTERCAMBIO IÓNICO; BIOPOLÍMEROS; RETENCIÓN SELECTIVA

La demanda de Li como material para el armado de baterías ha crecido enormemente en los últimos años. La extracción directa de litio (DLE por sus siglas en inglés) son tecnologías incipientes en la industria por su bajo impacto ambiental comparado a los métodos tradicionales, sus tiempos cortos en el proceso completo y su mayor eficiencia en la recuperación de litio. Dentro de este rubro de tecnologías se encuentran aquellas basadas en adsorción e intercambio iónico para la retención selectiva del litio. El proceso de adsorción tiene un mayor desarrollo actualmente, siendo este un método ya utilizado a escala industrial hace algunos años, en cambio, las resinas de intercambio iónico aún se encuentran en estudio llegándose recientemente a pruebas de planta piloto [1]. Algunos de los problemas que acarrearán estos materiales es su estabilidad en los ciclos de operación.

Uno de los materiales que se destaca para su uso en resinas de intercambio iónico es el denominado HTO por su contenido de H, Ti y O y su sal litiada, LTO [1,2]. El intercambio iónico ocurre entre los H^+ de la forma delitiada y el Li^+ proveniente de la salmuera, proceso en el cual se forma el LTO. Este procedimiento puede revertirse al hacer un ciclo inverso y así regenerar el material.

Frente a la imposibilidad técnico industrial de usar el material en su forma de fino polvo debido a las grandes pérdidas de sólido, en este trabajo se propone estudiar la viabilidad de utilizar dos biopolímeros que cumplan el rol de darle sostén y estabilidad al material en una disposición tal que conserve la porosidad y características necesarias para que ocurra el intercambio iónico H^+/Li^+ [3].

En complemento de la síntesis de estos materiales propuestos, se estudió la capacidad de retención en salmueras artificiales, la respuesta de estos frente a diferentes concentraciones de Li iniciales y la influencia del tiempo de contacto con la solución en la capacidad de retención. Ambos materiales fueron puestos a prueba en dos disposiciones diferentes, con y sin recubrimiento de LTO. Se realizaron ensayos en batch manteniendo la relación S/L fija, aquellos recubiertos con LTO fueron los que mostraron mejores resultados llegando a un 99% de retención de Li(I), lo que demuestra que el uso de biopolímeros como soporte de un material selectivo para la retención de Li puede ser una estrategia prometedora para su escalado industrial.

[1] Y. Gao, Y. Sun, L. Chen, Y. Tan, R. Fan, C. Hai, H. Zhang, ACS Omega, 10(12) (2025) 11643–11657.

[2] H. Lin, X. Yu, M. Li, J. Duo, Y. Guo, T. Deng, ACS Appl. Mater. Interfaces, 11(29) (2019) 26364–26372.

[3] X. Feng, Z. Xiao, S. Sui, Q. Wang, Y. Xie, Holzforschung, 68(4) (2014) 427–433.



PREPARACION Y EVALUACION DE CEMENTOS ACTIVADOS ALCALINAMENTE A PARTIR DE ESCORIA NACIONAL

A. Basso¹, B. J. Ríos¹, C. Garayzabal², **M.R. Gauna^{2,3*}**, T.V. Lupori^{3,4}, C. Rocco³.

1- EESTN⁶ Albert Thomas, Av. 1 n°1120; La Plata, Argentina.

2- CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica; Cno. Centenario y 506; M. B. Gonnet; Argentina.

3- Depto. Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería, UNLP; Av. 1 y 47; La Plata; Argentina.

4- UIDIC, Unidad de Investigación y desarrollo en Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería, UNLP, 115 y 48; La Plata, Argentina.

*matias.gauna@ing.unlp.edu.ar

Palabras claves: CEMENTOS ALCALINOS; ESCORIA; CENIZA VOLANTE

Si bien existen registros de que el estudio de los cementos activados alcalinamente comenzó a partir de 1940, tuvo un desarrollo importante, sobre todo en Europa, en los 70 y más recientemente un aumento notable con el creciente interés por la sostenibilidad y la reducción de emisiones de CO₂ [1]. El presente trabajo consiste en obtener a partir de una escoria nacional materiales cementantes alternativos al cemento portland con la finalidad de sustituirlo o al menos reemplazar una parte del mismo, y de esta forma, reducir indirectamente las emisiones de gases de efecto invernadero. La activación de la escoria se realizó a partir de diferentes concentraciones de álcali y se compararon con los materiales sin activar, preparados con agua destilada.

En principio se desea optimizar la relación sólido/líquido de las pastas, para ellos se evaluaron varias relaciones con agua destilada (0,35, 0,40, y 0,45). Luego las mezclas activadas se prepararon con dicha relación. Como activador se empleó un álcali (KOH) y teniendo en cuenta la bibliografía consultada [2], se propusieron dos concentraciones diferentes de activación (0,5 M y 1 M)

Para evaluar y comparar los materiales cementantes se prepararon cubos de 25 mm en moldes metálicos, los cuales luego de las 24 Hs. se desmoldan y se colocan en cámara húmeda (100%) hasta la edad de su ensayo. Las edades de evaluación fueron de 7, 21 y 28 días.

Los ensayos realizados consistieron en la determinación de porosidad y densidad por Arquímedes, difracción de rayos X (DRX) y evaluación mediante el método de Rietveld (cuantificación de amorfo y cristalino), microscopía electrónica de barrido (SEM) de la superficie de fractura y ensayo de compresión para determinar la carga máxima.

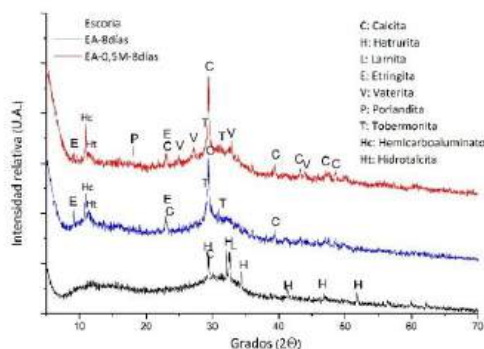


Figura 1. Difractogramas de la escoria de alto horno y de las pastas luego de 8 días de activación. Negro: escoria, Azul: pasta con agua destilada y Rojo: pasta con solución alcalina 0,5 M.

A través de los ensayos de difracción, se determinaron fases en concordancia con hormigones convencionales, además se observa por SEM geles característicos que también se pueden apreciar por DRX. A partir de los ensayos de compresión se obtuvieron resultados óptimos a 28 días, lo que permitiría emplear la escoria para la obtención de hormigones alcalinos aptos para la construcción de viviendas.

[1] S.A. Miller, V.M. John, S.A. Pacca, A. Horvath, Cem. Concr. Res., 114 (2018) 115–124.

[2] T. Luukkonen, Z. Abdollahnejad, J. Yliniemi, P. Kinnunen, M. Illikainen, Cem. Concr. Res., 103 (2018) 2–34.



ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA DEL TETRABORATO DE LITIO ($\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$) MEDIANTE EL MÉTODO DE REFINAMIENTO DE RIETVELD: COMPARACIÓN DE MÉTODOS DE SÍNTESIS POR REACCIONES DE AUTOCOMBUSTIÓN

O.Y. Gomez^{a*}, J.E. Tasca^a, F.M. Ortega^a, M. Santiago^b, C. Hucailuk^c, C.E. Oubiña^c, D.F. Lionello^c, D.R. Vega^c

^a Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Provincia de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA-CONICET, Facultad de Ingeniería (FIO), Olavarría, Buenos Aires, Argentina.

^b Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Provincia de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA-CONICET, Instituto de Física Arroyo Seco (IFAS), Tandil, Buenos Aires, Argentina.

^c Departamento Física de la Materia Condensada, GAIDI, CAC, CNEA, Buenos Aires, Argentina.

*ornella.gomez@fio.unicen.edu.ar

Palabras claves: TETRABORATO DE LITIO; MÉTODOS DE SÍNTESIS, AUTOCOMBUSTIÓN, DIFRACCIÓN DE RAYOS X; REFINAMIENTO DE RIETVELD

En el presente trabajo se estudia la estructura cristalina de los polvos de tetraborato de litio ($\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$, TBL) obtenidos mediante los métodos de síntesis por reacciones de autocombustión convencional y en solución empleando como combustibles: ácido cítrico, glicina y urea. El TBL es un material inorgánico con diversas aplicaciones tecnológicas, despertando mayor interés su uso como detector en dosimetría personal y clínica. Esta aplicación se debe principalmente a su coeficiente de absorción prácticamente similar al del tejido humano [1], lo que permite una estimación más precisa de la dosis absorbida por éste durante su exposición a la radiación ionizante [2], como en tratamientos de radioterapia. La sensibilidad y las propiedades dosimétricas de estos materiales dependerán, además de los materiales de partida y del tamaño de partícula, de los defectos estructurales e impurezas introducidas durante su fabricación [2–4].

La estructura cristalina de los polvos de TBL fue resuelta y refinada mediante el método de Rietveld a partir de los datos de difracción de los mismos. En los difractogramas obtenidos para las síntesis con ácido cítrico (Figura 1) y glicina se encontraron solamente reflexiones correspondientes a la estructura del TBL, celda tetragonal con parámetros de red $\mathbf{a} = \mathbf{b} = 9.48 \text{ \AA}$ y $\mathbf{c} = 10.28 \text{ \AA}$. Por el contrario, en el difractograma de la síntesis con urea se encontraron, además de las reflexiones del TBL, algunas que se pueden atribuir al metaborato de Li (LiBO_2 , MBL) cuya celda es monoclinica con parámetros de red $\mathbf{a} = 5.82 \text{ \AA}$, $\mathbf{b} = 4.38 \text{ \AA}$, $\mathbf{c} = 6.48 \text{ \AA}$ y $\beta = 115.139^\circ$.

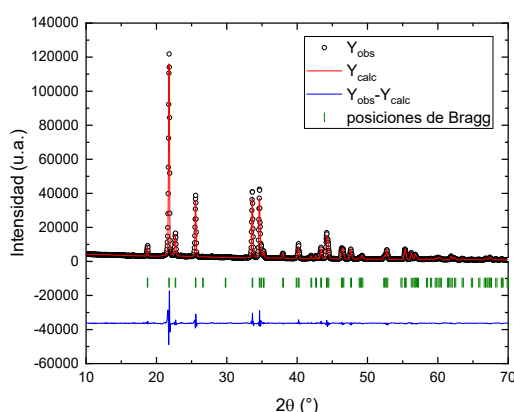


Figura 1. Refinamiento de Rietveld de la muestra de TBL sintetizada con ácido cítrico

[1] E. Cruz-Zaragoza, C. Furetta, J. Marcazzó, M. Santiago, C. Guarneros, M. Pacio, R. Palomino, J. Lumin. 179 (2016) 260–264.

[2] L. Singh, V. Chopra, S.P. Lochab, J. Lumin. 131 (2011) 1177–1183.

[3] N. El-Faramawy, M. Sabry, S. Farouk, M. El-Kinawy, A. Mafodda, C. Woda, Appl. Radiat. Isot. 191 (2023) 110533.

[4] B. Tiwari, R. K. Chaudhary, A. Srivastava, R. Kumar, M. Sonawane, Radiat. Meas. 151 (2022) 106704.



ANÁLISIS DE DOLOMITA POR DRX ANTES Y DESPUÉS DE UN PROCESO DE REMOCIÓN DE METALES PESADOS

O.Y. Gomez^{ab*}, G. Portela^{ab}, M. Iberra^b, C.C. Wagner^{ab}, J. E. Tasca^{ab}, D.F. Lionello^c

^a Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Provincia de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA – CONICET, Olavarría, Buenos Aires, Argentina.

^b Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), Facultad de Ingeniería, INMAT, Olavarría, Buenos Aires, Argentina.

^c Departamento Física de la Materia Condensada, GAIDI, CAC, CNEA, Buenos Aires, Argentina.

*ornella.gomez@fio.unicen.edu.ar

Palabras claves: ADSORCIÓN; DOLOMITA; METALES PESADOS; DRX

En el presente trabajo se estudia la estructura cristalina de dolomita natural utilizada para remover plomo de soluciones acuosas. Para ello, se empleó la técnica de caracterización estructural de Difracción de Rayos X (DRX) para analizar el mineral antes y después de su uso como adsorbente. La dolomita es un mineral compuesto principalmente por carbonato de calcio y magnesio [$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$] y se encuentra disponible en grandes yacimientos. En Argentina, uno de los principales depósitos se ubica en la formación Cerro Negro del grupo Sierras Bayas, en la ciudad de Olavarría [1]. Debido a su bajo costo y gran disponibilidad, este mineral puede ser considerado un adsorbente económico y por otro lado, estudios previos han demostrado la capacidad de la dolomita para remover metales pesados y tóxicos [2]. Dentro de estos, el plomo es de particular interés debido a su extrema toxicidad y los graves efectos que representa para la salud humana [3].

El proceso de remoción de Pb^{2+} se llevó a cabo utilizando una fracción de dolomita natural en polvo, obtenida industrialmente. Los ensayos se realizaron en solución acuosa, variando la concentración inicial de plomo entre 100 y 2000 mg/L. La estructura cristalina de los polvos de dolomita antes (DN) y después del proceso de remoción (DR), fue resuelta y refinada mediante el método de Rietveld, de manera posterior a la identificación de las fases presentes. En la Figura 1 puede observarse que para DN se encontraron reflexiones correspondientes a dolomita (celda romboédrica, $a = b = 4.81 \text{ \AA}$ y $c = 16.00 \text{ \AA}$), cuarzo (celda hexagonal, $a = b = 4.91 \text{ \AA}$ y $c = 5.40 \text{ \AA}$) y calcita (celda romboédrica, $a = b = 4.98 \text{ \AA}$ y $c = 17.03 \text{ \AA}$). Por otro lado, para DR las reflexiones encontradas corresponden a dolomita (celda romboédrica, $a = b = 4.81 \text{ \AA}$ y $c = 16.02 \text{ \AA}$), cerusita (celda ortorrómbica, $a = 5.18 \text{ \AA}$, $b = 8.50 \text{ \AA}$ y $c = 6.14 \text{ \AA}$) y cuarzo (celda hexagonal, $a = b = 4.91 \text{ \AA}$ y $c = 5.40 \text{ \AA}$), sin presencia de reflexiones asociadas a la calcita.

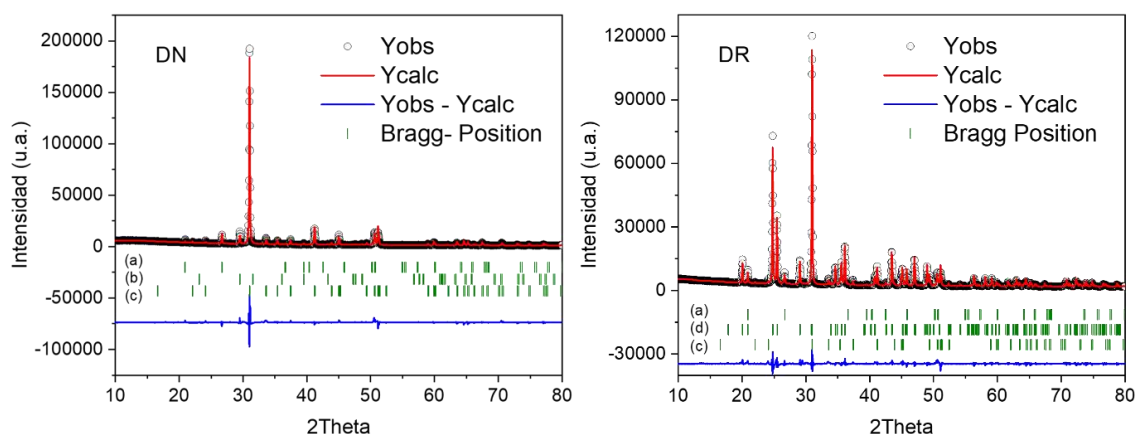


Figura 1. Refinamiento de Rietveld DN y DR: (a) cuarzo, (b) calcita, (c) dolomita, (d) cerusita

[1] P.E. Zalba, M. Morosi, M.S. Conconi, L. Segovia, Arcillas de Tandilia. Geología, mineralogía y propiedades tecnológicas, Ed. Comisión de Investigaciones Científicas, La Plata, 2010.

[2] Z. Khoshraftar, H. Masoumi, A. Ghaemi, Case Studies in Chem. and Environ. Eng. 7 (2023) 100276.

[3] A. L. Wani, A. Ara, J.A. Usmani, Interdisciplinary Toxicology, 8 (2016) 55–64



ANÁLISIS DEL CRECIMIENTO DE GRANOS MEDIANTE RECOCIDO DIRECCIONAL CÍCLICO EN ALAMBRES PSEUDOELÁSTICOS DE Fe-Ni-Co-Al-Ti-B

L.M. Guerrero^{a*}, M.F. Giordana^a, C.E. Sobrero^a, J.A. Malarría^a

^a Instituto de Física Rosario (IFIR), CONICET-UNR, Rosario, Argentina

*guerrerosalazar@ifir-conicet.gov.ar

Palabras claves: RECOCIDO DIRECCIONAL CÍCLICO; PSEUDOELASTICIDAD; ALEACIONES BASE Fe; TRANSFORMACIÓN MARTENSÍTICA; EBSD

La aleación Fe-Ni-Co-Al-Ti-B muestra excelentes propiedades pseudoelásticas de hasta un 13% de deformación reversible en policristales texturados. Esto se debe a la presencia de una transformación martensítica (TM) desde una fase madre fcc (γ) a una fase producto bct (α'), el carácter termoelástico está dado por la precipitación de una fase bcc (γ'). Sin embargo, esta aleación puede presentar un comportamiento frágil debido a la presencia de una fase secundaria bcc (β) que es del tipo NiAl con una estructura B2 y se forma predominantemente en los bordes de grano y actúa como centro de anclaje [1,2]. Aunque no sea deseable en cuanto a las propiedades funcionales y estructurales, la presencia y cantidad de la fase β puede utilizarse para controlar el crecimiento del grano austenítico durante tratamientos térmicos. La disolución de la fase β permite un proceso de recristalización secundaria que aumenta el tamaño de grano de la fase γ (fcc) hasta 500 micrómetros o más. En el presente trabajo se busca aprovechar esto último al realizar un tratamiento de recocido direccional cíclico (RDC) que permita mover los bordes de grano al hacer pasar la muestra por una espira inductora a una temperatura mayor a la de disolución de la fase β con una velocidad muy lenta que posibilite tener un frente de recristalización homogéneo [3]. Para determinar este crecimiento granular se usarán imágenes de microscopía óptica, para estudiar el cambio en la composición química se usará EDS y SEM, para determinar las orientaciones de los cristales se usará EBSD. Por último, todo esto se comparará con lo reportado en la bibliografía.

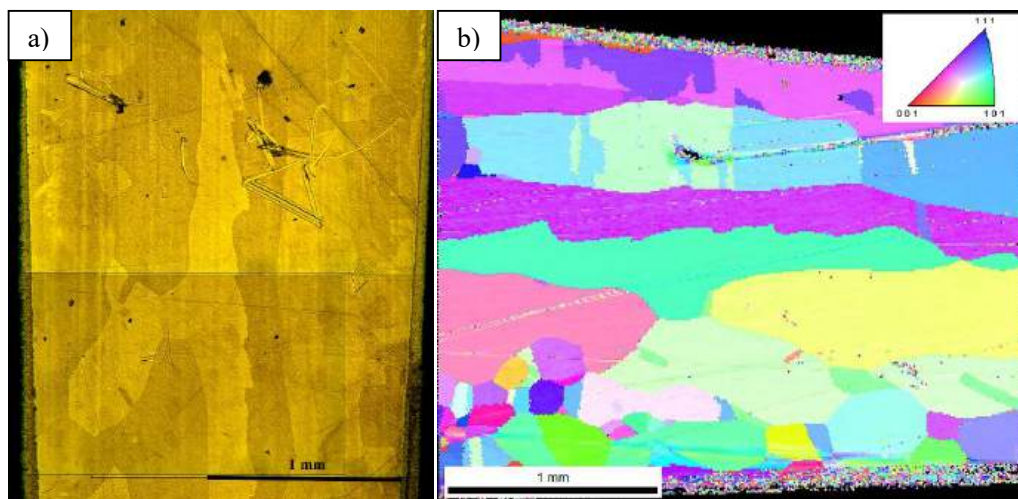


Figura 1. a) Imagen de la muestra tratada con RDC, b) EBSD vista desde la dirección de trefilado

En la Figura 1. Se puede observar una muestra tratada mediante RDC, el tamaño de grano antes del tratamiento era de aproximadamente 260 μm y en la Figura 1. a) puede verse que los granos se alargaron hasta aproximadamente 2 mm, en la Figura 1. b) se pueden observar que los granos se orientan más cerca de la dirección (001) lo cual favorece bastante el comportamiento pseudoelástico.

[1] Fu H., Li W., Song S., Jiang Y., Xie J.; J. Alloys Compd. 684 (2016) 556–563.

[2] Cassinerio J., Giordana M.F., Zelaya E., Remich V., Kroß P., Freudenberger J., Niendorf T., Sobrero C.E., Shap. Mem. Superelasticity 10 (2024) 37–44.

[3] Du K., Zhang Y., Zhao G., Huang T., Liu L., Li H., Wang X., Mater. Sci. Eng. A 890 (2024) 145858



ESTUDIO *IN-SITU* POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE POLVOS CON LUZ SINCROTRÓN DE NUEVOS MATERIALES DE ELECTRODO PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO SIMÉTRICAS: TRANSICIONES DE FASE Y ESTABILIDAD QUÍMICA

M.B. Arcentales Vera^a, E.E. Asto Ramos^a, L.M. Toscani^a, A.L. Larralde^b, Stefania Orozco Gil^c, C. Huck-Iriart^{a,d}, S.J.A. Figueroa^e, **D.G. Lamas^{a*}**

^a Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), CONICET-Universidad Nacional de San Martín, Escuela de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

^b CONICET/Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

^c UNIDEF, MINDEF-CONICET, CITEDEF, Departamento de Materiales Avanzados y Procesos Estratégicos, Villa Martelli, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

^d Sincrotrón ALBA, Cerdanyola del Vallès, Barcelona, España.

^e Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS), Centro Nacional de Pesquisa em Energia y Materiales (CNPEM), Campinas, SP, Brasil.

*dlamas@unsam.edu.ar

Palabras claves: CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO; SOFC; ESTUDIOS *IN-SITU*; LUZ SINCROTRÓN

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFCs, por sus siglas en inglés) son dispositivos electroquímicos de alta eficiencia para la generación de energía, con bajo impacto ambiental y gran flexibilidad en la elección del combustible. Las SOFCs convencionales operan a altas temperaturas (900–1000 °C), aunque se están haciendo grandes esfuerzos por reducir la temperatura de operación sin comprometer el desempeño de la celda. En este contexto, actualmente se están evaluando las SOFCs de temperatura intermedia (IT-SOFCs), que funcionan entre 500 y 800 °C. En consecuencia, se investigan materiales de electrodo con conducción mixta iónica-electrónica (MIECs), que favorecen la implementación de esta tecnología.

Recientemente, se propuso un nuevo diseño denominado SOFCs simétricas (S-SOFCs), que propone el uso del mismo material para ambos electrodos. Esta configuración atiende aspectos tecnológicos muy importantes, como la compatibilidad térmica de los materiales y la reducción de las etapas de fabricación. Además, la configuración simétrica permite invertir la entrada de gases entre ánodo y cátodo, oxidando el carbono que podría formarse en el ánodo durante la operación con hidrocarburos a baja temperatura de trabajo. De esta manera, se disminuyen los costos de fabricación y de mantenimiento de los dispositivos. Sin embargo, las S-SOFCs imponen requisitos fisicoquímicos y catalíticos más estrictos sobre los materiales de electrodo, ya que deben funcionar satisfactoriamente tanto como ánodo y como cátodo, lo que implica no sólo presentar excelentes propiedades electrocatalíticas para las respectivas reacciones, sino además tener buena estabilidad química en atmósferas reductoras y oxidantes, alta conductividad eléctrica y un coeficiente de expansión térmica similar al del electrolito.

Una estrategia para identificar nuevos electrodos para S-SOFCs es evaluar perovskitas de la forma $A(B,B')O_{3-\delta}$ o doble perovskitas $A_2(B,B')_2O_{6-\delta}$, donde los elementos B y B' se seleccionan por su alta estabilidad y propiedades catalíticas hacia las reacciones catódicas y anódicas, respectivamente. Por ejemplo, B = Co, Fe, Mn, etc., con alto desempeño en la reacción de reducción de oxígeno, se puede combinar con B' = Cr, Ti, Mo, etc., cationes que promueven la reacción de oxidación del combustible.

En este trabajo presentaremos nuestros estudios recientes de difracción de polvos de rayos X *in-situ* sobre doble perovskitas de $Sr_2Co_{2-x}Mo_xO_{6-\delta}$ y $Sr_2Fe_{2-x}Mo_xO_{6-\delta}$, donde las composiciones ricas en Co y en Fe muestran buen desempeño como materiales catódicos, mientras que la incorporación de Mo mejora la performance anódica. Todas las muestras fueron evaluadas bajo condiciones catódicas y anódicas a temperaturas de hasta 800 °C. Estos experimentos se realizaron en la línea de luz PAINEIRA del sincrotrón Sirius (LNLS-CNPEM, Brasil). Encontramos que las composiciones con x cercano a 1, más relevantes para la aplicación en S-SOFCs, presentan problemas de estabilidad tanto en condiciones oxidantes como reductoras. Por este motivo, también evaluamos la incorporación de un catión adicional, como Ni o Cu, en el sitio B, y pudimos verificar que, en condiciones apropiadas, mejora la estabilidad del electrodo sin afectar su performance electroquímica. También presentaremos nuestros avances en el diseño de celdas electroquímicas para estudios *operando*.



ESTUDIO DE LA DINAMICA DE CARGA Y DESCARGA DE DOXORRUBICINA EN NANOPARTICULAS DE CaCO_3 VATERITA

M.M. Gonzalez^a, P. Di Prátula^a, M. Mendez^a, J. Farfán^b, L. Fernández Albanesi^c, M.L. Graso^c,
D.G. Lamas^{d*}, A.L. Soldati^{a,d}

^aDepartamento Desarrollo de Radioisótopos y Radiofármacos, INTECNUS-CNEA, Bariloche, Río Negro, Argentina.

^bFacultad de ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba Capital, Argentina.

^cDepartamento Fisicoquímica de Materiales - GIA – GAIDI, CAB-CNEA, Bariloche, Río Negro, Argentina,

^dLaboratorio de Cristalografía Aplicada, Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), CONICET-UNSAM, San Martín, Buenos Aires, Argentina.

^eInstituto de Nanociencia y Nanotecnología, CAB-CNEA, Bariloche, Río Negro, Argentina,

*dlamas@unsam.edu.ar

Palabras claves: NANOPARTICULAS DE CaCO_3 ; POLIMORFISMO; VATERITA; DELIVERY DE FÁRMACO.

La vaterita, un polimorfo metaestable del carbonato de calcio (CaCO_3), es un material biocompatible con propiedades interesantes para aplicaciones biomédicas, como el transporte y la liberación de fármacos. Su baja toxicidad y polimorfismo mediado por pH, sumado al alto valor del área superficial que presenta en sus formas nanoparticuladas, lo hacen un candidato ideal para la liberación controlada de fármacos en terapias contra el cáncer [1].

En esta oportunidad se estudiaron las propiedades de carga y descarga de las nanopartículas (NPs) en 3 morfologías distintas: esféricas, lenticular y framboidal. Para la prueba se utilizó doxorrubicina (DOX), un fármaco de amplio uso clínico como agente anticancerígeno, que gracias a su coloración rojiza permite cuantificar concentración por técnicas de espectroscopía en el rango visible. La descarga se generó a través del cambio de pH, simulando el entorno ácido de las células cancerígenas. Las NPs se caracterizaron en sus distintos estados polimórficos usando las técnicas de difracción de rayos X de polvos (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y área específica superficial (BET) confirmando la variación polimórfica y la transformación estructural de las NPs a lo largo del proceso. El sistema (NPs-DOX) presentó una capacidad de carga mayor al 50% m/m luego del cuarto ciclo de carga (Figura 1). Durante la etapa de descarga, se evidenció de manera visual la liberación de DOX, y se demostró por microscopía SEM la transformación a calcita de todas las morfologías, resultando un desafío a futuro el estudio cinético de la descarga controlada de este sistema.

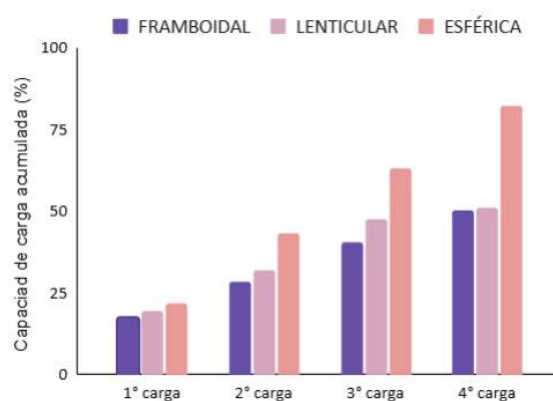


Figura 1. Capacidad de carga acumulada de DOX discriminado por morfologías en cada una de sus etapas.

[1] E.A. Khudina, D.V. Tsyupka, D. Drozd, I. Goryacheva; O.A. Goryacheva., J. Drug Deliv., 55 (2020) 10147.



SÍNTESIS MECANOQUÍMICA DE COMPOSITOS CERÁMICOS COMO CÁTODOS EN SOFC

D. H. Lizarraga^{a*}, D. Zanetti de Florio^b, D. G. Lamas^c, C. A. López^a

^a INTEQUI (CONICET-UNSL), Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950, San Luis, Argentina;

^b Center for Engineering, Modeling and Applied Social Sciences, Federal University of ABC, Santo André 09210-580, SP, Brazil;

^c ITECA (UNSAM-CONICET), Escuela de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, San Martín, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

*lizarragadiego99@gmail.com

Palabras claves: MOLIENTA REACTIVA DE ALTA ENERGÍA; SOFC; DRX; IMPEDANCIA ELECTROQUÍMICA

Las Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFC) son dispositivos electroquímicos altamente eficientes para generar energía, con bajo impacto ambiental y versatilidad en el uso de combustibles. Las celdas convencionales operan a 900–1000 °C, pero se busca imperiosamente reducir esta temperatura para abaratar costos y disminuir la degradación de sus componentes. En este marco surgen las SOFC de temperatura intermedia (IT-SOFC, 500–800 °C). Una alternativa para lograr este fin es el desarrollo de nuevos materiales con conducción mixta iónica-electrónica que mejoren el rendimiento de los electrodos en las SOFC [1].

Se han logrado buenos resultados usando como materiales catódicos compositos entre perovskitas simples como (La,Sr)(Mn,Co,Fe)O₃ (conductor mixto iónico-electrónico, MIEC) y un electrolito como Zr_{0.8}Y_{0.2}O₂ o Gd_{0.2}Ce_{0.8}O₂ (conductores iónicos). En el grupo de trabajo se ha reportado la fase Sr₁₁Mo₄O₂₃ (SMO) como un posible electrolito para SOFC, para la cual se resolvió su estructura y se propuso un mecanismo de conducción iónica originado por la movilidad de los iones O²⁻.

El método de síntesis es un aspecto fundamental en la obtención de este tipo de materiales ya que la microestructura juega un rol fundamental en sus propiedades eléctricas y catalíticas. El método mecanoquímico a través de Molienda de Alta Energía (HEBM, *High Energy Ball Milling*), como etapa previa al tratamiento térmico, presenta potenciales ventajas a otros métodos comúnmente utilizados, entre ellas, este método puede incluirse dentro de los métodos “verdes” de síntesis y permite la posibilidad de modificar el tamaño de las partículas hasta valores que sean los adecuados para la propiedad de interés [2].

En este trabajo se detalla la síntesis por HEBM y caracterización de las familias de compositos cerámicos ampliamente utilizados La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O₃/Gd_{0.2}Ce_{0.8}O₂ (LSCF/GDC) como así también de nuevos compositos La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O₃/Sr₁₁Mo₄O₂₃ (LSCF/SMO); ambas variando el %p/p de LSCF.

Las muestras se analizaron por difracción de rayos X (Figura 1A) y se refinaron las estructuras por el método Rietveld obteniendo tanto parámetros estructurales como micro-estructurales y de composición (Figura 1B). Además, se observaron valores de conductividad (por espectroscopía de impedancia) comparables con los reportados para otros métodos de síntesis (Figura 1C).

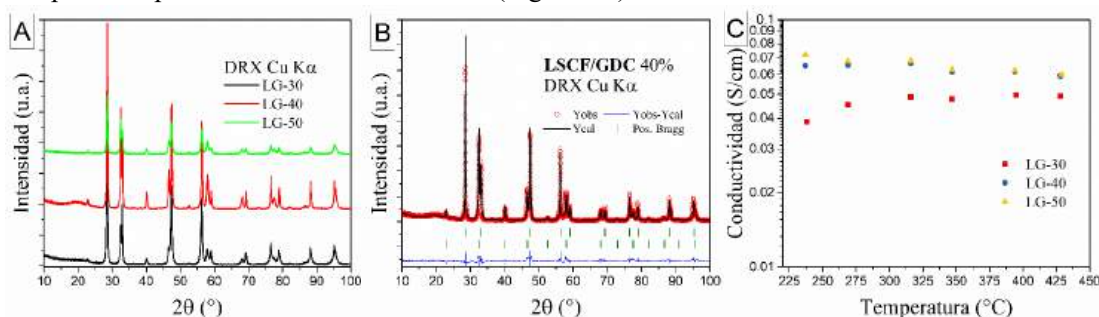


Figura 1. A) Comparación difractogramas LSCF/GDC; B) Refinamiento Rietveld LSCF/GDC 40%; C) Conductividad vs Temperatura familia LSCF/GDC

[1] Lin Y Q, Chen X M, J. Am. Ceram. Soc. 94 (2011) 782–788.

[2] E. Gaffet, G. Le Caër, Mechanical Milling. M. (eds) Nanomaterials and Nanochemistry. Springer, Berlin, Heidelberg 2008.



EXPERIENCIAS EN EL USO DE LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X Y EL MÉTODO RIETVELD EN LA INDUSTRIA DEL CEMENTO

F. Lavarra Marinelli^a, A.A. Godoy^b, C.A. López^{a*}

^a INTEQUI (UNSL-CONICET) y FQByF (UNSL), Almirante Brown 1455, 5700, San Luis, Argentina.

^b Cementos Avellaneda, La Calera, San Luis, Argentina.

*calopez@unsl.edu.ar

Palabras claves: DRX; RIETVELD; CLINKER; CEMENTO.

La difracción de rayos X (DRX) es una técnica analítica fundamental en la industria usada para la identificación y caracterización de fases cristalinas en materiales. Principalmente se utiliza para control de calidad, seguimiento de procesos de producción y desarrollo de nuevos materiales, siendo aplicada en sectores como la minería, la metalurgia, los cerámicos, la farmacéutica y los polímeros. El análisis de los patrones de difracción por el método Rietveld amplía la potencialidad de la técnica permitiendo realizar cuantificación de componentes cristalinos mayoritarios con relativa precisión y fiabilidad.

En la industria del cemento, la DRX es esencial para el control del proceso de clinkerización y la calidad del producto final. El clinker de cemento Portland contiene principalmente cuatro fases cristalinas mayoritarias: alita (Ca_3SiO_5 , C_3S , con varias formas monoclinicas y triclinicas), belita (Ca_2SiO_4 , C_2S , principalmente en fase β monoclinica), aluminato tricálcico ($\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$, C_3A , cúbico u ortorrómbico), ferrita ($\text{Ca}_4\text{AlFeO}_5$, C_4AF , ortorrómbica), entre otras fases minoritarias como: cal libre, periclase y cuarzo [1,2]. La cuantificación de dichas fases resulta fundamental para el control de calidad en la producción del Clinker. El método mas utilizado en la industria cementera es indirecto e implica la estimación de dichas fases a partir de la cuantificación elemental por Fluorescencias de rayos X (FRX) y el uso de las ecuaciones de Bogue según la norma ASTM C150M-17 o la norma IRAM 1504. Sin embargo, el método directo para la cuantificación de estas fases es a través del refinamiento Rietveld de los patrones de DRX, como lo indica la norma ASTM C1365 para el cálculo de fases en el cemento. Además, este método puede ser de interés para la caracterización de materias primas como la piedra caliza y yeso o el producto final: cemento Portland.

En este trabajo se presentan y discuten las ventajas del uso de la DRX con refinamiento Rietveld en el análisis de productos en el proceso de fabricación de cemento. Para ello, se analizaron siete muestras testigo de Clinker y los resultados cuantitativos se comparan con los estimados por las ecuaciones de Bogue. Se discuten y analizan aspectos que pueden afectar la cuantificación como por ejemplo las orientaciones preferenciales. En la figura 1 se muestra el refinamiento de una muestra de Clinker (a), las fases identificadas (b) y la cuantificación de fases comparadas con los resultados de las ecuaciones de Bogue (c). Finalmente, se presenta la aplicación y optimización del método para el análisis de la calidad de la caliza donde se cuantifican las fases: calcita, aragonita, dolomita y cuarzo.

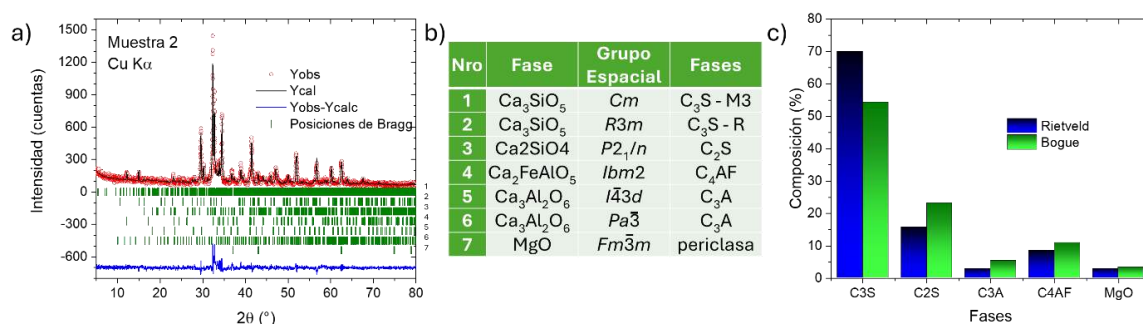


Figura 1. a) Refinamiento Rietveld, b) fases identificadas y cuantificadas y c) comparación de la composición obtenida por Rietveld y ecuaciones de Bogue.

[1] M.A.G. Aranda, Á.G. De la Torre, L. León-Reina, Rev. mineral. geochem. 74 (1) (2012) 169–209.

[2] M.-N. de Noirfontaine, M. Courtiall, F. Dunstetter, G. Gasecki, M. Signes-Frehel, Z. Kristallogr. 227 (2012) 102–112.



INVESTIGACIÓN DE FASES CRISTALINAS EN $\text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{Cr}_{0,50}\text{Mn}_{0,50}\text{O}_3$ SINTETIZADO POR SOL-GEL MICELAR A DIFERENTES TEMPERATURAS DE CALCINACIÓN

G. Magalhães e Silva ^{a,c*}, D.G. Lamas ^b, M.C. de Abreu Fantini ^a

^aInstituto de Física Aplicada, Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, Brasil. ^bLaboratorio de Cristalografía Aplicada, Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), CONICET-UNSAM, San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. ^c Departamento de Almacenamiento de la Energía, Subgerencia Operativa de Energía y Movilidad, Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

*gmagalhaes@inti.gob.ar

Palabras claves: SOL-GEL MICELAR; CALCINACIÓN; PEROVSKITA; ELECTRODOS; SOFC

Las perovskitas $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Cr}_y\text{O}_3$ son candidatas para SOFC por su estabilidad y versatilidad. El $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (cátodo) ofrece alta conductividad, y el $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CrO}_3$ (interconector) gran estabilidad química; su combinación equimolar en el sitio B une ambas ventajas [1]. El dopaje de Sr^{2+} ($x = 0,25$) ajusta el factor de tolerancia y favorece la fase romboédrica, fase de interés para la aplicación.

En este trabajo, se sintetizó $\text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{Mn}_{0,50}\text{Cr}_{0,50}\text{O}_3$ (75LSCM50) por sol-gel micelar, ruta de bajo costo y control de porosidad, sin antecedentes reportados para esta composición en SOFC. El objetivo fue evaluar la evolución de fases principales y secundarias según la calcinación (800, 1000 y 1300 °C), identificando transiciones y condiciones para obtener la fase romboédrica como principal, aportando bases para optimizar la síntesis de electrodos SOFC.

La síntesis sol-gel micelar se realizó con Pluronic® P123 (agente director) y 1,3,5-triisopropilbenceno (agente expansor). El material se calcinó a 800, 1000 y 1300 °C y se caracterizó por DRX a temperatura ambiente (Bruker, D8 Da Vinci Discover), identificando fases mediante comparación con patrones ICSD.

Las muestras 75LSCM50 calcinadas entre 800 y 1300 °C presentaron cristalinidad total ya a 800 °C, aunque con picos no deseables indicativos de naturaleza multifásica. La intensidad de estos picos disminuyó con la temperatura, lo que indica una mayor predominancia de la fase principal. Todas exhibieron estructura perovskita, sin fase cúbica ($Pm\bar{3}m$) tipo CaTiO_3 , y con fase romboédrica ($R\bar{3}c$) tipo NdAlO_3 ya a 800 °C. A 800 °C y 1000 °C, esta fase coexiste con la ortorrómbica ($Pbnm$). A 1300 °C, la romboédrica se convirtió en la única fase perovskita, evidenciando que el aumento de la temperatura favorece su cristalización y estabilización. El método sol-gel micelar alcanzó esta predominancia a 1300 °C, mientras que la reacción en estado sólido requiere 1500 °C (con óxidos residuales), la coprecipitación 1200 °C (con fases amorfas), y la gelificación-combustión y el sol-gel convencional la obtienen a 1050 °C y 900 °C, respectivamente, sin mención de fases indeseadas. La identificación de fases no compatibles se realizó mediante revisión bibliográfica, búsqueda automatizada (X'Pert HighScore, FindIt) y comparación con la base ICSD, siendo SrCrO_4 ($P2_1/n$) el candidato más recurrente. Todas las muestras presentaron picos no deseables, con disminución en cantidad e intensidad a medida que aumentó la temperatura de calcinación: 28 picos a 800 °C (máx. $2\theta = 27,41^\circ$, $I/I_0 = 14,04\%$), 16 picos a 1000 °C ($2\theta = 18,14^\circ$, $I/I_0 = 6,71\%$) y 11 picos a 1300 °C ($2\theta = 18,18^\circ$, $I/I_0 = 4,78\%$). El SrCrO_4 pasó de ser predominante a 800 °C (18 picos; máx. = 14,04% en $27,41^\circ$) a presente a 1000 °C (5 picos; máx. = 3,40% en $27,43^\circ$) y ausente a 1300 °C, con desaparición de los picos característicos en $27,42^\circ$, $29,76^\circ$ y $25,88^\circ$. Esta eliminación coincidió con la estabilización de la fase romboédrica. La composición de las fases no deseables varió con la temperatura: a 800 °C, MnO_2 ($I4/m$), Mn_3O_4 ($I4_1/amd$) e indicios de La_2O_3 ($P6_3/mmc$); a 1000 °C, CrMn_2O_4 ($I4_1/amd$), SrCrO_4 , Sr_2CrO_4 ($Pna2_1$) y posibles SrMnO_3 ($C222_1$) y SrO_2 ($I4_1/amd$); a 1300 °C, reducción máxima con $\text{Cr}_{1,8}\text{Mn}_{1,2}\text{O}_4$ ($Fd-3m$), SrCr_2O_7 ($P4_2/mmc$), LaMn_2O_5 ($Pbam$) y Sr_2CrO_4 , sin predominio definido. Todas las muestras presentaron al menos un pico no identificado, siendo solo uno en la muestra de 1300 °C.

A 800 °C coexisten las fases ortorrómbica y romboédrica con mucha diversidad de fases no deseables; a 1000 °C se redujo drásticamente el SrCrO_4 y aparecieron nuevas fases; a 1300 °C se obtuvo exclusivamente la fase romboédrica, sin presencia SrCrO_4 y con mínimo contenido no deseable. La ruta sol-gel micelar produjo materiales totalmente cristalinos y, a 1300 °C, próximos al estado monofásico, demostrando alta eficiencia y potencial de optimización.

[1] Morales, et al. Pilas de Combustible de Óxidos Sólidos (SOFC). Centro de la cultura popular canaria, 2008.



INFLUENCIA DE LA [SiC] (= 0; 20; 60; 100 y 120 g/L) SOBRE LA ESTRUCTURA CRISTALINA EN RECUBRIMIENTOS DE ZnNi/SiC ELECTRODEPOSITADOS EN SUSTRATO DE Ni

G. Magalhães e Silva ^{a*}, A.L. Larralde ^{a,b}, G. Abuin ^a, J.J. Arroyo Gómez ^{a,b}

^a Departamento de Almacenamiento y Conversión de la Energía, Subgerencia Operativa de Energía y Movilidad, Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), Argentina. ^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina.

*gmagalhaes@inti.gob.ar

Palabras claves: ELECTRODEPÓSITO; ZnNi; CARBURO DE SILICIO; FASES CRISTALINAS; H₂ VERDE

Los electrolizadores alcalinos son tecnologías maduras para la producción de H₂ verde, pero requieren electrodos estables frente a medios fuertemente básicos. Los recubrimientos ZnNi/SiC, conocidos por su resistencia a la corrosión, emergen como promisorios puntos de partida [1]. Aunque ampliamente estudiados en contextos anticorrosivos, no se hallan reportes sobre su uso como electrodos en electrólisis alcalina. Entre las fases cristalinas posibles de la aleación ZnNi, la γ (estructura cúbica BCC) presenta alta resistencia química, y su formación puede ser favorecida por la incorporación de SiC. Se plantea que una matriz monofásica γ podría además optimizar la movilidad electrónica. Para evaluar esta hipótesis, se obtuvieron 5 recubrimientos de ZnNi/SiC por electrodeposición galvanostática (con densidad de corriente de 8 A·dm⁻² y tiempo de electrodeposición 10 min) sobre sustrato de Ni, y se caracterizaron por XRD (Cu-K α). Asimismo, se analizó el efecto de la [SiC] (= 0, 20, 60, 100 y 120 g/L) sobre la estructura cristalina.

Se identificó la presencia de γ -ZnNi en todas las muestras, así como SiC ($2\theta \approx 35,58^\circ$), excepto para [SiC] = 0, confirmando que el proceso de electrodeposición fue exitoso. También, se detectó en todas las muestras el pico característico del Ni metálico ($2\theta \approx 76,3^\circ$), indicando la presencia, probablemente, del sustrato. En los resultados que siguen, de modo general, los valores entre paréntesis corresponden a la intensidad relativa (I/I_0) y a la posición angular (2θ) de los picos característicos identificados por XRD. En la muestra [SiC] = 0, se identificó la fase γ -ZnNi como dominante ($I/I_0 = 100\%$, $2\theta = 42,4^\circ$), acompañada por η -ZnNi ($67,3^\circ$; 19%), Zn metálico ($42,8^\circ$; 59,1%) y un pico no identificado ($37,2^\circ$; 42,6%), conformando una estructura cristalina polifásica, mientras que, en la muestra [SiC] = 20, se observa una alteración significativa en la jerarquía cristalográfica: la fase del pico no identificado ($37,5^\circ$) se convirtió en dominante, superando a γ -ZnNi, cuya intensidad descendió a 41,4% ($42,7^\circ$). Se trata de un caso singular en la serie, al ser la única condición donde la fase γ no fue dominante. También se detectaron η -ZnNi ($67,7^\circ$; 55,5%) y Zn metálico ($43,1^\circ$; 65,3%). En la muestra [SiC] = 60, la fase γ -ZnNi recuperó su dominancia ($42,8^\circ$; 100%), aunque acompañada por intensidades muy elevadas en fases secundarias: η -ZnNi ($67,7^\circ$; 82,6%), Zn metálico ($43,1^\circ$; 98,3%) y el pico no identificado ($37,6^\circ$; 96,8%). La presencia simultánea de múltiples picos con intensidades próximas a las de la fase principal evidencia una estructura con alta heterogeneidad cristalográfica. Esta configuración puede reducir la movilidad electrónica y consecuentemente el desempeño funcional del recubrimiento. En marcado contraste, la muestra con [SiC] = 100 presentó la fase γ -ZnNi como única fase metálica ($42,5^\circ$; 100%), acompañada solo por señales de SiC y Ni metálico. La ausencia total de η -ZnNi, Zn metálico y del pico no identificado, presentes en las demás condiciones, confirman la formación de una matriz metálica monofásica γ , único entre las condiciones ensayadas. Esta elevada pureza cristalográfica sugiere una estructura homogénea, favorable para una distribución uniforme de propiedades, mayor movilidad electrónica y menor probabilidad de zonas activas de corrosión o pérdida funcional.

En [SiC] = 120, la fase γ -ZnNi se mantuvo como la más intensa ($42,8^\circ$). Sin embargo, reaparecieron señales de η -ZnNi ($67,6^\circ$; 17,4%), Zn metálico ($43,2^\circ$; 53,1%) y el pico no identificado ($37,5^\circ$; 36,5%), indicando recomposición polifásica del recubrimiento, lo cual sugiere que la elevada [SiC] pudo haber superado un umbral de estabilidad en la formación selectiva de γ . En definitiva, la electrodeposición permitió obtener exitosamente recubrimientos ZnNi (con fase γ)/SiC sobre sustratos de Ni. Las distintas [SiC] generaron configuraciones polifásicas. En cambio, [SiC] = 100 g/L fue la única condición que estabilizó una matriz monofásica γ . Por lo tanto, una concentración de 100 g/L se perfila como la más prometedora dentro del intervalo estudiado, con alto potencial para aplicaciones electroquímicas exigentes.

[1] Mahmud. Nueva aleación más protectora: del laboratorio a la industria INTI, 212p. Buenos Aires 2018.



APLICACIÓN DE LA TÉCNICA DEL PARÁMETRO b DE MICA BLANCA POTÁSICA EN UNIDADES MESOZOICAS DE LOS ANDES FUEGUINOS ARGENTINOS

G.M. Martín^{a*}, M.P. Escayola^a, M.E. Lanfranchini^b

^a Instituto de Ciencias Polares, Ambiente y Recursos Naturales, Universidad Nacional de Tierra del Fuego

^b Instituto de Recursos Minerales, Universidad Nacional de La Plata – Comisión de Investigaciones Científicas de la provincia de Buenos Aires

*gmmartin@untdf.edu.ar

Palabras clave: MUSCOVITA-FENGITA; DRX; GEOBAROMETRÍA COMPARATIVA; SERIES DE PRESIÓN

Las micas blancas se clasifican sistemáticamente como micas dioctaédricas dentro del grupo de las micas [1]. Se caracterizan por presentar una estructura en láminas 2:1 (dos capas tetraédricas que flanquean una octaédrica), con ocupación parcial del sitio octaédrico por Al y sustituciones variables de Si, Mg y Fe. Dentro de las micas blancas potásicas se encuentran muscovita ($\text{KAl}_2(\text{AlSi}_3\text{O}_{10})(\text{OH})_2$) y fengita, que es una variedad enriquecida en Si ($>3,1$ apfu) y con contenidos de Mg y Fe, característica de ambientes metamórficos de alta presión. Ambos minerales cristalizan en la clase monoclinica, con grupo espacial $C2/c$. [2].

La variación en la dimensión b de la celda unidad en mica blanca potásica constituye un cambio estructural vinculado a la sustitución $\text{Si} \leftrightarrow \text{Al}$ en el sitio tetraédrico. Esta variación en la estructura cristalina y la química mineral es sensible a la presión, por lo que su medición permite evaluar de manera comparativa las condiciones de presión metamórfica que afectaron a rocas metapelíticas de muy bajo y bajo grado. Su determinación se puede realizar mediante difracción de rayos X (DRX), a partir del espaciado que corresponde al plano cristalino (060) de la mica dioctaédrica y un estándar interno, generalmente el pico (211) de cuarzo [3].

En el presente trabajo se estudiaron metapelitas de las formaciones mesozoicas Lapataia, Lemaire y Yahgan aflorantes en distintos sectores de los Andes Fueguinos argentinos. Estas rocas fueron analizadas mediante DRX con el objetivo de calcular el parámetro b de mica blanca, aplicando el criterio de Guidotti y Sassi (1986) para discriminar las muestras en series de baja, media y alta presión [4].

A *prima facie*, los valores obtenidos, sugieren que las litologías metapelíticas de las formaciones Yahgan y Lapataia se habrían metamorfozado principalmente bajo condiciones que corresponden a una serie de presión alta (9,0414-9,0461 Å y 9,0269-9,0462 Å, respectivamente). En contraparte, la Formación Lemaire presenta resultados más variables que en su mayoría son propios de una serie de presión media (8,9909-9,0346 Å). Cabe señalar que en algunos casos el parámetro b puede verse modificado por procesos deformacionales locales, aspecto que requiere estudios complementarios de microestructura y texturas, no abordados en este trabajo [5].

Estos datos regionales representan un aporte significativo al conocimiento del metamorfismo dinamo-térmico en los Andes Fueguinos argentinos, dado que el único antecedente geobarométrico disponible hasta el momento correspondía a la Formación Lapataia, con un valor estimado de 4 kbar [6]. No obstante, para conferir mayor robustez a la interpretación, será necesario ampliar el muestreo de manera sistemática y profundizar en estudios a menor escala. Asimismo, resulta fundamental complementarlos con otras técnicas geotermobarométricas que permitan precisar con mayor detalle el contexto metamórfico y su evolución [5].

[1] M. Rieder, G. Cavazzini, Y.S. D'yakonov, V.A. Frank-Kamenetskii, G. Gottardi, S. Guggenheim, D.R. Wones. Nomenclature of the micas. *Clays and clay minerals*, 46 (1998), 586–595.

[2] J.W. Anthony, R.A. Bideaux, K.W. Bladh, M.C. Nichols, *Handbook of Mineralogy: Silica, silicates* (Vol. 5). Mineralogical Society of America. Chantilly 2003.

[3] M. Frey, D. Robinson, *Low-grade metamorphism*. Blackwell Science, 313 p. Oxford 1999.

[4] C.V. Guidotti, F.P. Sassi, *Neues Jahrbuch für Mineralogie Abhandlungen* 153 (1986), 363–380.

[5] G.M. Martín, Tesis doctoral. UNLP - FCNyM (en preparación).

[6] R.D. Acevedo, *Revista de la Asociación Geológica Argentina* 50 (1995), 237–242.



CRISTALINIDAD DE LA ILLITA COMO INDICADOR DE GRADO METAMÓRFICO EN METAPELITAS MESOZOICAS DE LOS ANDES FUEGUINOS ARGENTINOS

G.M. Martín^{a*}, M.P. Escayola^a, M.E. Lanfranchini^b

^a Instituto de Ciencias Polares, Ambiente y Recursos Naturales, Universidad Nacional de Tierra del Fuego

^b Instituto de Recursos Minerales, Universidad Nacional de La Plata – Comisión de Investigaciones Científicas de la provincia de Buenos Aires

*gmmartin@untdf.edu.ar

Palabras clave: ÍNDICE DE KÜBLER; GRADO METAMÓRFICO; CUENCA DE ROCAS VERDES

Illita se utiliza comúnmente como un término descriptivo para designar una serie composicionalmente amplia dentro de las micas dioctaédricas. Se considera una variedad de muscovita deficiente en potasio, caracterizada por valores de K generalmente en el rango de 0,6-0,85 apfu y fórmulas representativas tipo $K_{0,65}Al_{2,0}(Al_{0,65}Si_{3,35})O_{10}(OH)_2$. No obstante, “illita” no está reconocida como especie mineral válida por la IMA-CNMMN, por lo que se emplea en sentido paragenético y composicional más que sistemático [1].

Bajo condiciones metamórficas de muy bajo a bajo grado, illita experimenta un incremento progresivo en el tamaño del dominio cristalino y una disminución en el número de defectos estructurales [2]. El Índice de Kübler (IK), o cristalinidad de la illita, se determina midiendo el ancho a mitad de altura (FWHM) de la primera reflexión basal de illita-muscovita en $\approx 10 \text{ \AA}$ [3]. Esta técnica constituye el método más utilizado para discriminar zonas metamórficas en metapelitas, que en orden de grado creciente se definen como: anquizona inferior, anquizona superior y epizona [4].

En este estudio se aplicó el IK en metapelitas de las formaciones mesozoicas Lapataia, Lemaire y Yahgan. Los resultados se expresaron en la escala *Cristallinity Index Standard* (CIS) y fueron calibrados con los estándares de [5].

Los resultados para la Formación Lapataia la ubican dentro de la epizona, con valores de $\Delta^\circ 2\theta$ comprendidos entre 0,27 y 0,24. Esto es consistente con resultados geotermobarométricos previos en esta unidad que señalan temperaturas metamórficas de hasta 300°C, aunque obtenidos en litologías diferentes [6]. En la Formación Lemaire se observa una variabilidad vinculada a la posición geográfica: al sur del valle de Tierra Mayor predominan casi exclusivamente valores epizonales (0,36-0,26 $\Delta^\circ 2\theta$), mientras que, al norte, en sierra Alvear, los registros corresponden completamente a la anquizona superior (0,40-0,36 $\Delta^\circ 2\theta$). Hacia el este, en el cerro Coronado, se identificó una muestra epizonal (0,26 $\Delta^\circ 2\theta$). En la Formación Yahgan, al igual que en la Formación Lapataia, los datos obtenidos corresponden exclusivamente a la epizona (0,31-0,24 $\Delta^\circ 2\theta$).

Estos resultados constituyen la primera aproximación de alcance regional basada en cristalinidad de la illita en los Andes Fueguinos argentinos. Se evidencia un contraste entre las rocas anquizonales de la Formación Lemaire aflorantes en sierra Alvear y aquellas del sector más austral, en su mayoría epizonales. Asimismo, la similitud entre los valores de la Formación Lapataia y algunos de la Formación Lemaire reabre el debate sobre la génesis de la primera, tema ampliamente discutido en los antecedentes bibliográficos de la región [7].

Si bien la interpretación del IK requiere cautela, dado que no constituye un indicador unívoco del grado metamórfico y sus valores pueden estar influenciados, no solo por la temperatura sino también por la presión de fluidos, la litología y la composición química de illita [2], estos resultados representan un aporte valioso que deberá integrarse con otros estudios geotermobarométricos para precisar la trayectoria metamórfica de las unidades mesozoicas fueguinas [8].

[1] M. Rieder, G. Cavazzini, Y.S. D'yakonov, V.A. Frank-Kamenetskii, G. Gottardi, S. Guggenheim, D.R. Wones, *Clays and clay minerals*, 46 (1998) 586–595.

[2] M. Frey, *Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen*, 66 (1987) 13–27.

[3] B. Kübler, *Bulletin Centre Recherche Pau-SNPA*, 2 (1968), 385–397.

[4] L.N. Warr, R.F. Mählmann, *Clay Minerals*, 50 (2015) 283–286.

[5] L.N. Warr, A.H.N. Rice, *Journal of Metamorphic Geology*, 12 (1994) 141–152.

[6] R.D. Acevedo, *Revista de la Asociación Geológica Argentina* 50 (1995), 237–242.

[7] R. Caminos, *Segundo Simposio de Geología Regional Argentina*, Córdoba, Argentina, 1980, pp. 1463–1501.

[8] G.M. Martín, Tesis doctoral. UNLP - FCNyM (en preparación).



INFLUENCIA DE LA CRISTALIZACIÓN DEL BLOQUE PCL EN UNA RESINA EPOXI FOTOPOLIMERIZADA MODIFICADA CON PCL-b-PEO PARA IMPRESIÓN 3D

A. Mateos^{a*}, F. Herrera^b, I.A. Zucchi^a, W.F. Schroeder^a

^a Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Mar del Plata, B7600FDQ, Argentina.

^b Laboratorio Argentino Haces de Neutrones-CNEA, Villa Maipú, B1650LWP, Argentina.

* ailin@fi.mdp.edu.ar

Palabras claves: COPOLÍMEROS; RESINAS FOTOPOLIMERIZABLES; CDSA (AUTOENSAMBLADO INDUCIDO POR CRISTALIZACIÓN); IMPRESIÓN 3D.

La técnica de “Impresión 3D” consiste en la manufactura aditiva de objetos físicos reales a partir de modelos virtuales tridimensionales obtenidos por diseño computarizado y permite generar objetos de gran complejidad de manera sencilla, personalizada y con muy poco desperdicio, a través de la utilización de tecnologías de costo relativamente bajo. Sin embargo, a pesar del progreso significativo logrado en los últimos años en la impresión 3D de polímeros, todavía existen limitaciones y desafíos a resolver [1,2]. Una tecnología prometedora para obtener piezas poliméricas complejas es la impresión 3D basada en fotopolimerización, en la que el barrido de un haz láser (estereolitografía, SLA) o el patrón estacionario generado por un proyector (procesamiento digital a través de luz, DLP) se utilizan para fotopolimerizar un monómero o resina apropiada, capa por capa, hasta que se completa la pieza [3]. Un método de preparación de nanoestructuras a medida que se adapta a los requisitos de la fotoimpresión 3D, es el autoensamblado de copolímeros de bloque (CB). Cuando un CB se dispersa en un monómero reactivo o resina que actúa como solvente selectivo para uno de los bloques, el CB tiende a auto-ordenarse en una variedad de morfologías micelares, tales como esferas, cilindros, vesículas y otras formas más complejas. Bajo estas condiciones, el bloque soluble queda orientado hacia el solvente continuo y conforma la corona de la micela, mientras que la parte insoluble queda hacia el interior formando el núcleo. Recientemente, se ha demostrado que, si el bloque que forma el núcleo es capaz de cristalizar, la morfología desarrollada es gobernada por una competencia entre la cristalización del núcleo y el estiramiento de la corona [4].

El objetivo principal del trabajo es el de desarrollar formulaciones fotopolimerizables basadas en resinas epoxi que se optimizarán para su uso en la impresión 3D. Se utilizaron los mecanismos de microseparación de fases inducido por reacción (RIMPS, *reaction induced microphase separation*) y autoensamblado inducido por cristalización (CDSA, *crystallization-driven self-assembly*) del copolímero de bloque comercial PCL-b-PEO (16300-b-5000, Polymer Source) y monómero epoxi DGEBA. Se utilizaron dos resinas diferentes, por un lado, DGEBA (DER 332, Aldrich Chemical Co.); y, por otro, una mezcla 50 % p/p de DGEBA y 50 % p/p de PGE (fenil glicidil éter, Aldrich Chemical Co.). El primer resultado prometedor se logró a partir del análisis de imágenes obtenidas por microscopía electrónica de transmisión (TEM) de muestras homogeneizadas y fotopolimerizadas conteniendo 10, 20 y 30% p/p de PCL-b-PEO. Se observó en ambas resinas la formación de estructuras micelares elongadas tipo cintas, que se apilan unas sobre otras generando un efecto tipo *stacking*. La presencia de este tipo de estructuras fue verificada mediante las curvas obtenidas por la técnica de SAXS (dispersión de rayos X a bajo ángulo). A través de la técnica de XRD (difracción de rayos X) se pudo visualizar el comportamiento cristalino del bloque PCL dada la presencia de los picos de difracción de los planos cristalográficos de dicho bloque. Finalmente, mediciones de WAXS (dispersión de rayos X a alto ángulo) permitieron identificar diferencias claras en la miscibilidad del copolímero en las resinas utilizadas, característica interesante a la hora de analizar el comportamiento de cristalización del bloque PCL, el cual confiere propiedades funcionales al material.

[1] C. Tawk, G. Alici, *Advanced Intelligent Systems*, 3 (2021) 2000223–2000241.

[2] M. Nadgorny, Z. Xiao, C. Chen, L. Connal, *ACS Applied Materials and Interfaces*, 10 (2018) 17489–17507.

[3] A. Bagheri, J. Jin, *ACS Applied Polymer Materials*, 1 (2019) 593–611.

[4] Y. He, Y. Tang, Y. Zhang, L. MacFarlane, J. Shang, H. Shi, Q. Xie, H. Zhao, I. Manners, J. Guo, *Applied Physics Review*, 9 (2022) 0231301–0231316.



CRISTALIZACIÓN DE HIDROXIAPATITA EN CEMENTOS ÓSEOS MODIFICADOS CON ALOE VERA Y PARTÍCULAS DE BIOVIDRIO

L. D. Matilla*, P.M. Botta, M.A. Fanovich

Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, INTEMA (CONICET-UNMdP), Colón 10850, 7600 Mar del Plata, Argentina

*ldmatilla@gmail.com

Palabras claves: CEMENTOS ÓSEOS; FOSFATOS DE CALCIO; BIOVIDRIO, ALOE VERA

Los cementos de fosfato de calcio (CPC) constituyen biomateriales que han despertado interés, debido a su excelente desempeño para aplicaciones clínicas [1,2]. Estos cementos óseos se obtienen mediante la mezcla de una fase sólida (polvo) con una fase líquida (solución), dando lugar a una pasta inicial que fragua en cuestión de minutos, lo cual los convierte en materiales idóneos para el relleno de defectos óseos. El endurecimiento de la pasta moldeable ocurre a temperatura corporal mediante un mecanismo de disolución-precipitación, con formación de cristales de hidroxiapatita (HA). La incorporación de partículas de vidrio bioactivo a los CPC potencia la regeneración ósea, otorgándole a la pasta mayor bioactividad, y favoreciendo la formación de nuevo tejido óseo, que se ancla químicamente al material en ensayos in vivo. Por otro lado, el uso de extractos naturales como fase líquida en los CPC es una estrategia casi inexplorada. El extracto obtenido del gel de *Aloe vera* (AV), posee reconocidas propiedades, antiinflamatorias, antimicrobianas y antioxidantes, entre otras, que resultan atractivas para su utilización en la formación del CPC.

Este trabajo tiene como objetivo investigar los efectos combinados del extracto de Aloe vera y el biovidrio sobre el comportamiento de fraguado, la transformación de fases y la microestructura de los CPC. Para ello, se prepararon cementos utilizando tanto la fase líquida convencional, como el extracto de AV. Además, se implementó una novedosa metodología de mezcla en dos etapas, diseñada para mejorar la cinética de fraguado y la homogeneidad estructural. Los resultados revelan que el Aloe vera favorece eficazmente el fraguado y la formación de cristales aciculares de hidroxiapatita en la formulación base de CPC (Fig. 1), cuyas características morfológicas dependen del contenido de biovidrio. El agregado de hasta un 10% de partículas de biovidrio en la fase sólida del cemento, junto con el empleo del método de mezcla en dos etapas, optimiza significativamente el tiempo de fraguado, alcanzando valores adecuados para aplicaciones clínicas. Los ensayos preliminares de biocompatibilidad, realizados con embriones de pez cebra, indican la ausencia de efectos citotóxicos para todas las formulaciones preparadas.

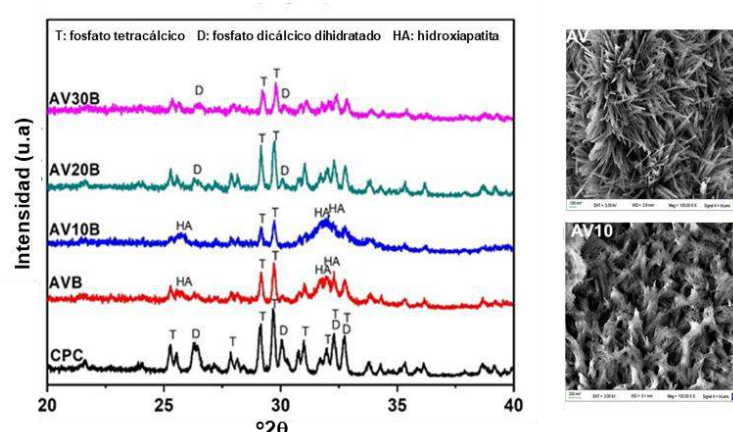


Figura 1. Diagramas de DRX de los cementos fraguados con AV y diferentes contenidos de biovidrio (0 a 30%). Imágenes SEM de los cementos con 0 y 10% de biovidrio.

- [1] D. Liu, C. Cui, W. Chen, J. Shi, B. Li, S. Chen, J. Funct. Biomater. 14 (2023) 134–151.
- [2] O. Demir-Oguz, A.R. Boccaccini, D. Loca, Bioactive Mater. 19 (2023) 217–236.

**CARACTERIZACIÓN CRISTALOGRÁFICA DE TIERRA DE DIATOMEAS ADORNADAS CON NANO-PARTÍCULAS DE ÓXIDO DE HIERRO MEDIANTE MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN****L. Menger^{a*}, D. Cuscuela^{a,b,c}, G. De Micco^{a,b}, G. Fougá^{a,b}, A. Zelaya^{a,b}**^a Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA). Av. Bustillo 9500, 8400 S.C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina.^c Universidad Nacional de Cuyo, Instituto Balseiro, Avenida Bustillo 9500, 8400 S.C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

*lucasmenger@cnea.gob.ar

Palabras claves: FILTRO; DIATOMEAS; ARSÉNICO; ADSORCIÓN

Una gran problemática a nivel mundial ha surgido de la detección de As en aguas subterráneas en más de 70 países [1]. Si bien en grandes centros urbanos la remoción de As se efectúa mediante plantas potabilizadoras, en zonas rurales aisladas como existen en la Patagonia la remoción por adsorción es una mejor opción. Por este motivo, se estudia la utilización de tierras de diatomea como material adsorbente. Adicionalmente las diatomeas son un material abundante en la región Patagónica. Investigaciones previas realizadas en nuestro laboratorio han demostrado que es posible mejorar la capacidad de adsorción de las diatomeas mediante su modificación superficial, en particular la incorporación de hierro ha producido aumentos sustanciales en la remoción de As en aguas. En este trabajo se caracteriza mediante diversas técnicas de TEM las diatomeas expuestas a diferentes concentraciones de hierro. En la Figura 1a. puede observarse una imagen de campo oscuro de una diatomea adornada con hierro. El SiO₂ amorfo de la diatomea genera un contraste tenue en tanto las estructuras cristalinas del óxido de hierro contribuyen con reflexiones intensas del orden de los pocos nanómetros. Asimismo, el patrón de difracción de área selecta revela la presencia de anillos consistente con la presencia de óxido de hierro sumados a los dos halos característicos producidos por el SiO₂ amorfo. La última Figura 1c es una imagen de alta resolución tomada sobre un borde de la diatomea donde estaba depositado el óxido de hierro. Las distancias interplanares medidas están en el rango de las distancias interatómicas de óxido de hierro.

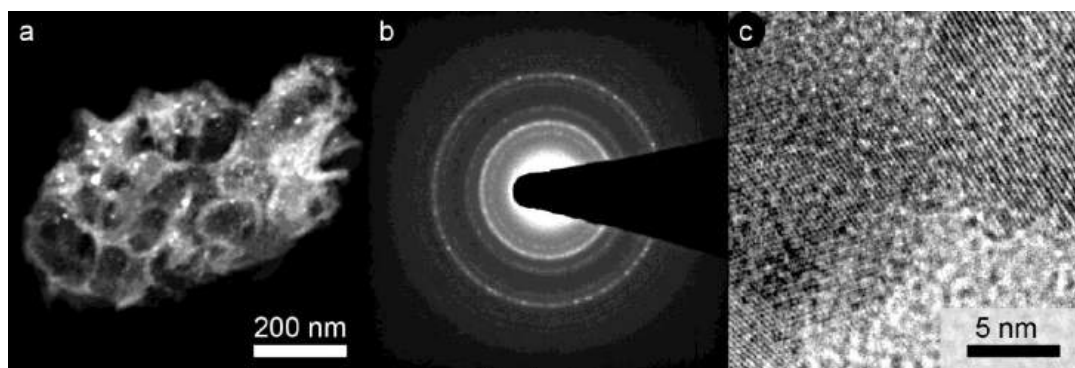


Figura 1: a. Imagen de campo oscuro tomada con una zona del primer anillo de la Figura 1b. b. patrón de difracción de área selecta de la diatomea decorada con Fe. c. Imagen de alta resolución del borde de la partícula mostrada en la Figura 1a).

[1] A. Chiavola, E.D'Amato, M.R. Boni, Int. J. Environ. Sci. Technol, 16 (2019) 6053–6064.



ESTUDIO *IN SITU* DE LA CAPTURA DE CO₂ CON Li₄SiO₄ A PARTIR DE DIATOMITA

M.L. Grasso^{a*}, P. Alonso-Sánchez^b, **M.J. Orozco^{c**}**, F. Cova^d,
M. V. Blanco^e, F. C. Gennari^a

^a Departamento. Fisicoquímica de Materiales, Gerencia de Investigación Aplicada, Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500, R8402AGP, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina.

^b Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA, CSIC-Universidad de Zaragoza), C/ Pedro Cerbuna 12, 50009, Zaragoza, España.

^c Instituto de Investigación en Tecnología Química (INTEQUI-UNSL/CONICET), Almirante Brown 1450, 5700 San Luis, Argentina.

^d Sincrotrón ALBA, Carrer de la Llum 2-26, 08290 Cerdanyola del Vallés 08290, España.

^e Departamento de Química del Estado Sólido, Instituto Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC), 08193 Bellaterra, Catalunya, España.

*grassomaria.laura@gmail.com // **maria.orozco@ib.edu.ar

Palabras claves: CO₂; CAPTURA; *IN SITU*; SINCROTRÓN

Dado el contexto actual de las emisiones de CO₂ y su impacto sobre el medio ambiente resulta apremiante el desarrollo de alternativas tecnológicas para su mitigación como las de CCUS (sigla en inglés, Carbon Capture, Utilization and Storage), aplicando materiales sólidos absorbentes de CO₂. En particular, el ortosilicato de litio (Li₄SiO₄) es un material atractivo debido a sus propiedades fisicoquímicas en la reacción con CO₂ (mostrando una capacidad de captura teórica de 36,7%), estabilidad química a altas temperaturas y reversibilidad tras ciclos de captura/liberación de CO₂. Se ha reportado para esta aplicación la factibilidad de obtener Li₄SiO₄ a partir de fuentes de Si de origen mineral [1,2], lo cual favorece aspectos relacionados a la accesibilidad y costos en la producción de estos materiales absorbentes.

En este trabajo, se propone estudiar *in situ* la reacción de captura de CO₂ utilizando una muestra de Li₄SiO₄ obtenida a partir de diatomita de la provincia de Río Negro (contenido de 70% en peso de Si). Este estudio evalúa la evolución (cualitativa y cuantitativamente) de las fases cristalinas identificadas antes, durante y después de la reacción de captura de CO₂ (Ec.1) entre T_{amb} y 700°C en flujo del gas reactivo al 100%. Para ello, se utilizará la técnica de difracción de rayos X *in situ* con fuente de radiación de sincrotrón y los datos experimentales obtenidos serán ajustados mediante el método Rietveld. De forma complementaria, se estudiará en las mismas condiciones experimentales, la interacción de CO₂ con Li₄SiO₄ y los eventos térmicos asociados mediante termogravimetría acoplada a la calorimetría diferencial de barrido (TG-DSC). Los resultados preliminares observados en Fig. 1 A sugieren que los productos de la reacción de captura de CO₂ (Li₂SiO₃ y Li₂CO₃) se forman a partir de los 400 °C, lo cual coincide con los cambios en la masa de la muestra y eventos térmicos registrados (Fig. 1B).

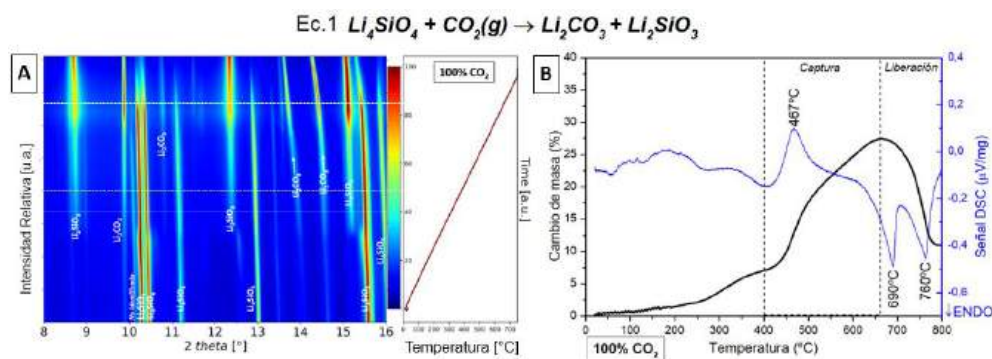


Figura 1. Gráfico de contorno a partir de difractogramas y curva TG-DSC durante la reacción Li₄SiO₄-CO₂

[1] S.Y. Shan, Q.M. Jia, L.H. Jiang, Q.C. Li, Y.M. Wang, J.H. Peng, Ceram Int. 39 (2013) 5437–5441.

[2] C. Yang, Z. Liu, M. Pan, H. Xu, Surf. Interfaces. 58 (2025) 105781.

**DESARROLLO DE NANOCRISTALES DE SnO_2 PARA BATERÍAS DE ION-LITIO**J. Brizuela^a, **M. Otero**^{a*}, D. Versaci^b, E. Leiva^a, M. V. Bracamonte^a^a Laboratorio de Energías Sustentables (LaES), Universidad Nacional de Córdoba (UNC)^b DISAT – Politecnico di Torino. Turin, Italia.

*otero@exa.unrc.edu.ar

Palabras claves: BATERÍAS; NANOMATERIALES; CRISTALOGRAFÍA; SnO_2 ; BIOCARBÓN

El avance en las tecnologías de almacenamiento de energía es fundamental para la transición hacia una sociedad más sostenible. Las baterías de ion-litio dominan el mercado debido a su alta densidad de energía y eficiencia, pero el desarrollo de nuevos materiales para sus electrodos sigue siendo un campo de intensa investigación. Materiales anódicos alternativos como el SnO_2 han captado gran interés debido a su excepcional capacidad específica. No obstante, su uso se ve limitado por la severa expansión volumétrica (hasta un 300%) durante la carga/descarga, lo que provoca la pulverización del electrodo y una rápida pérdida de capacidad.

En este trabajo, el dióxido de estaño (SnO_2) se combina con una matriz de biocarbón porosa (CHB), la cual es obtenida a partir de un subproducto agroindustrial abundante y de bajo costo: el pelo de vaca. Este enfoque no sólo explora la alta capacidad del SnO_2 como material anódico, sino que también integra principios de economía circular al valorizar un residuo. La matriz de biocarbón amortigua la expansión volumétrica de las nanopartículas de SnO_2 , manteniendo la integridad estructural del electrodo a lo largo de los ciclos de carga/descarga y previniendo la degradación del material. La síntesis del biocarbón se realizó mediante un proceso de pirólisis simple [1], seguido de una síntesis química para la formación de las nanopartículas de SnO_2 [2]. El compuesto obtenido se denotó CHB+ SnO_2 .

Los patrones de difracción obtenidos por difracción de rayos-X (Figura 1a) confirmaron la presencia de una fase cristalina de SnO_2 , con picos de difracción ensanchados, característicos de dominios cristalinos en la escala nanométrica. La estimación del tamaño de los cristallitos, utilizando la ecuación de Scherrer, indicó un tamaño promedio de 2.3 nm. Las imágenes obtenidas por Microscopía Electrónica de Transmisión (Figura 1b) confirmaron la presencia de nanocristales de SnO_2 embebidas de manera homogénea en la matriz de biocarbón.

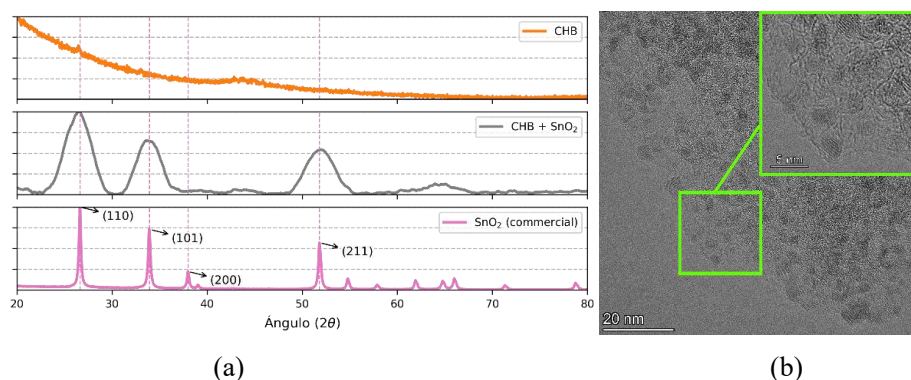


Figura 1. (a) XRD de CHB, CHB+ SnO_2 y de SnO_2 comercial. (b) TEM del compuesto CHB+ SnO_2 .

La formación de nanopartículas de SnO_2 con un tamaño de 2,3 nm y alta cristalinidad es un factor determinante para el éxito de este material. La reducción extrema del tamaño de las partículas no sólo mitiga la expansión volumétrica, sino que también acorta significativamente las distancias de difusión para los iones de litio y los electrones, lo que resulta en una cinética de reacción más rápida y una mayor tasa de carga.

[1] D. Versaci, A. Costanzo, S.M. Ronchetti, B. Onida, J. Amici, C. Francia, S. Bodoardo, *Electrochimica Acta*, 367 (2021) 137489

[2] M.V. Bracamonte, G.L. Luque, C.A. Calderón, F. Cometto, S. Raviolo, M. Cozzarin, E.P.M. Leiva, D. Barraco, *ChemistrySelect*, 8(42) (2023) e202302443.



AMBLYGONITE- MONTEBRASITE FROM YATASTO-SAN BERNARDO LITHIUM DEPOSIT: CHARACTERIZATION BY XRD

J.C. Oyarzabal^{a*}, V. Giardino^a

^a Instituto de Ciencias Polares, Ambiente y Recursos Naturales, Universidad Nacional de Tierra del Fuego

*joyarzabal@untdf.edu.ar

Keywords: AMBLYGONITE; XRD; UNIT-CELL PARAMETERS; PHOSPHATE

Amblygonite-montebbrasite series and tavorite constitute the amblygonite mineral group, all of them are phosphates with a generic formula $AB(PO_4)X$ and symmetry $\bar{P}1$ [1]. The amblygonite-montebbrasite series shows complete solid solution with ideal composition $LiAl(PO_4)F-LiAl(PO_4)(OH)$; members more F-rich than those with $F/(F+OH) \sim 0.65$ are uncommon, the compositional boundary between the two is at $F/(F+OH) = 0.30$ [2].

Some specimens of this mineral were found and identified as part of the lithium-bearing paragenesis in the inner intermediate zone of the Yatasto-San Bernardo pegmatite, San Luis, Argentina, [3]. X-ray diffraction (XRD) was used to determine its unit-cell parameters: a 6.652(3) Å, b 7.736(2) Å, c 6.915(3) Å, α 90.34(4)°, β 117.40(2)°, γ 91.07(3)°, and V 315.83(1) Å³; with axial ratios, using b as unit axis, of 0.859:1:0.839 [4]. On the basis of the methodology proposed by [5], which relates the unit cell constants a , b , c , and V to the content $F/(F+OH)$ ratio, the parameters obtained allow to classify the species as the amblygonite member into de amblygonite-montebbrasite series, with high $F/(F+OH)$ ratios, ranging from 0.81 to 0.84 (Fig. 1) [4].

The identification of amblygonite as F rich member of the studied series leads a very important petrogenetic implications, according to this mineral assemblage suggests crystallization under conditions of high fP and fF [4].

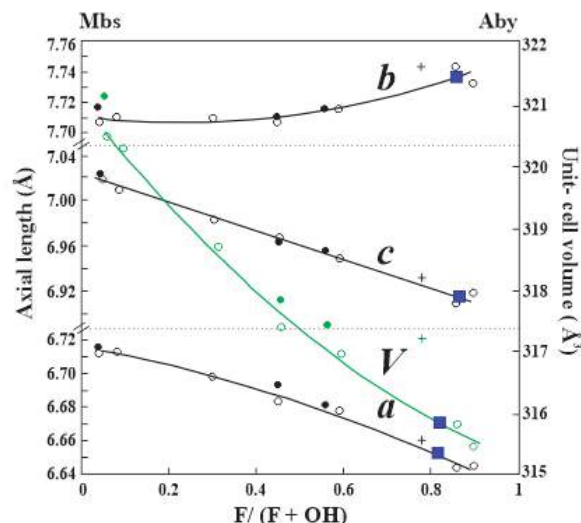


Figure 1. Unit-cell parameters vs. $F/(F + OH)$ for amblygonite-montebbrasite series, after [5], filled circles represent neutron diffraction data, and crosses and filled circles correspond to XRD measurements. Blue squares indicate amblygonite data from the Yatasto-San Bernardo samples [4].

[1] M. Back, J. Mandarino. Fleischer's Glossary of Mineral Species, Min. Rec, 342p. Tucson 2008.

[2] L.A Groat, M. Raudsepp, F. Hawthorne, T.S. Ercit, B.L. Sherriff, J.S. Hartman, Am. Min., 75 (1990) 992–1008.

[3] S. Cadile, J. Oyarzabal, M.B Roquet. 7° MINMET, Río Cuarto, Argentina, 2004, Actas 155–160.

[4] C.V. Giardino, Trabajo Final de Tesis Licenciatura ICPA-UNTDF, 2024, unpublished, 122p.

[5] L.A. Groat, B.C. Chakoumakos, D.H. Brouwer, C.M. Hoffman, C.A. Fyfe, H. Morell, H. A. J. Schultz, Am. Min., 88 (2003) 195–210.



EFFECTOS ESTRUCTURALES Y OPTOELECTRÓNICOS DEL DOPAJE CON Eu^{3+} Y Na^+ EN LA PEROVSKITA HÍBRIDA $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$

V.D. Ponce^{a*}, G.E. Gomez^a, A.P. Ayala^b, J.E.F.S. Rodrigues^c, J.A. Alonso^d, G.E. Narda^a, C.A. López^a

^a INTEQUI (UNSL-CONICET), FQByF (UNSL), Almirante Brown 1455 (5700), San Luis, Argentina.

^b Laboratório de Cristalografia Estrutural, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará, Brasil.

^c European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) - 71, Grenoble, Francia.

^d Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid, CSIC, Cantoblanco 28049, Madrid, España.

*vanesap70@gmail.com

Palabras claves: PEROVSKITAS; LANTÁNIDOS; DISPOSITIVOS OPTOELECTRÓNICOS.

Los haluros de perovskitas híbridas orgánicas – inorgánicas han recibido una gran atención como materiales emisores de luz debido a sus excelentes propiedades optoelectrónicas, tales como amplia respuesta espectral, longitudes de onda emisión ajustables y alta movilidad de carga. Estas características han permitido su aplicación en sistemas de diodos emisores de luz (LEDs), detectores de rayos X, fotodetectores, láseres y celdas solares [1, 2]. En los últimos años, se ha incrementado el interés por el dopaje de los haluros de perovskitas con lantánidos los cuales suelen ocupar el sitio B de la red cristalina. Dicho dopaje aprovecha sus transiciones electrónicas características del tipo $4f \rightarrow 5d$ y $4f \rightarrow 4f$, responsables de señales de luminiscencia intensas y estables [3].

Este trabajo se centra en la síntesis por coprecipitación y caracterización de una serie de perovskitas híbridas con fórmula general $\text{MAPb}_{1-2x}\text{Eu}_x\text{Na}_x\text{Br}_3$ donde $x = 0, 0.01, 0.05$ y 0.1 (MA=metilamonio). Posteriormente las muestras fueron caracterizadas estructuralmente mediante difracción de rayos X de polvo, tanto convencional como de luz sincrotrón, seguida de análisis Rietveld. Dicho estudio permitió ajustar los parámetros estructurales y corroborar la presencia de diferentes fases cristalinas en el rango de temperatura entre 100K a 400K (ortorrómbica: $Pnma$, tetragonal: $I4/mcm$ y cubica: $Pm\bar{3}m$). Además, se realizó el estudio morfológico mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), donde se observaron cristales de $\sim 10\mu\text{m}$ de espesor. Se encontró que el hábito cristalino tiende a una forma cúbica a medida que aumenta el dopaje del lantánido. Este comportamiento se explicó a partir de datos microestructurales obtenidos mediante refinamientos Rietveld, los cuales demostraron un mayor crecimiento del cristal hacia el plano (100), comparados con los planos (110) y (111). Finalmente, se estudiaron las propiedades ópticas y eléctricas de estas fases. La caracterización fotofísica se llevó a cabo mediante espectroscopía de emisión y medidas de decaimientos de la luminiscencia para calcular los tiempos de vida (τ_{obs}), tanto a temperatura ambiente como en el rango de 20K a 300K. Ante excitación con láser a 405 nm, se observa la típica banda de emisión centrada en el verde, originada por la transición directa desde el límite de la banda de valencia (formada por una mezcla Pb 6s–Br 4p) hacia la banda de conducción (Pb 6p) [4] y los τ_{obs} obtenidos fueron en el rango de 3 a 7 ns. En los estudios en temperatura, se observó el desplazamiento de la banda de emisión en la región del verde (entre 490 nm a 560 nm) del espectro visible, así como un desdoblamiento en las bandas de emisión conforme se incrementa la concentración de dopaje. En cuanto a las propiedades eléctricas, se obtuvieron curvas I-V y respuestas de fotocorriente bajo pulsos de luz con LEDs a diferentes longitudes de onda. Ambos análisis mostraron diferencias en la corriente eléctrica a determinados voltajes entre la matriz sin dopar y las dopadas, así como también una respuesta selectiva del material frente a determinadas longitudes de onda. Los resultados obtenidos son promisorios para el diseño de materiales cristalinos para ser utilizados en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos basados en películas delgadas.

[1] H. Wang, Y. Shen, C. Gao, S. Ban, J. Bi, J. Huang, B. Wu, W. Ning, Adv. Mater. Interfaces, 12 (2025) 2500194.

[2] N. Wang, B. Zhuang, T. Pang, L. Zeng, D. Chen, Laser Photonics Rev. (2025) e00905.

[3] J.-L. Pan, Y.-J. Yu, Y.-K. Wang, L.-S. Liao, Adv. Funct. Mater. 34 (2024) 2401327.

[4] Q. Zhu, K. Zheng, M. Abdellah, A. Generalov, D. Haase, S. Carlson, Y. Niu, J. Heimdahl, A. Engdahl, M.E. Messing, T. Pullerits, S.E. Canton, Phys. Chem. Chem. Phys. 18 (2016) 14933–14940.



DESCOMPOSICIÓN DE AMONIACO MEDIANTE ESTRUCTURAS RUDDLESDEN - POPPER

C. del C. Quiroga Valenzuela^{a*}, F.W. Wyss^a, A.L. Larralde^b

^a Instituto Nacional de Tecnología Industrial.

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

*cquiroga@inti.gob.ar

Palabras claves: PEROVSKITAS RUDDLESDEN-POPPER; AMONIACO; REFINAMIENTOS DE RIETVELD

El surgimiento del hidrógeno (H_2) como vector energético ha impulsado la tecnología de las celdas de óxido sólido (SOC por sus siglas en inglés). Sin embargo, el H_2 presenta serios inconvenientes relacionados con el almacenamiento, transporte y seguridad. Así, el amoníaco (NH_3) surge como una alternativa apropiada para su uso, con aplicación directa en las llamadas celdas de combustible de óxido sólido operadas a amoníaco (DA-SOFCs). Los materiales para electrodos de estas celdas deben cumplir ciertos requerimientos de estabilidad, tanto química como térmica, entre otros. En este trabajo, se proponen óxidos con estructura de Ruddlesden-Popper (RP), preparados mediante la técnica de complejación por citratos.

Las perovskitas del tipo Ruddlesden-Popper, de fórmula general $A_{n+1}B_nO_{3n+1}$, están conformadas por capas de perovskita simple (ABO_3) y sal de roca (AO), alternadas y distribuidas a lo largo del eje c [1]. La sustitución catiónica en este tipo de estructuras da lugar a la generación de vacancias de oxígeno y, a la distorsión del ángulo entre el catión y el oxígeno, pudiendo resultar en un cambio estructural [2].

En este trabajo se presentarán los resultados del estudio de la familia de perovskitas RP con composición $La_{2-x}Ca_xCu_{1-y}Ni_yO_{4+\delta}$. Las medidas de difracción de rayos X de polvos mostraron que todas las estructuras se obtuvieron en su forma pura. La Fig. 1, muestra los datos de los experimentos de descomposición de amoníaco catalizada por las perovskitas RP sintetizadas.

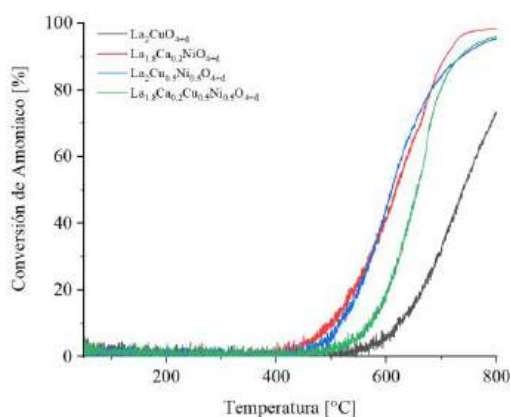


Figura 1. Descomposición de amoníaco utilizando distintos óxidos con estructura de R.P.

En la figura se observa que la temperatura de la descomposición depende de la composición de los óxidos, siendo el $La_{1.8}Ca_{0.2}NiO_{4+\delta}$ el más eficiente, ya que la conversión se logra a menor temperatura.

El trabajo presentado incluirá resultados de los refinamientos de Rietveld que nos permitirán determinar los parámetros cristalográficos y, con análisis complementarios, relacionarlos con las propiedades de descomposición del combustible.

[1] S.N. Ruddlesden, P. Popper, Acta Cryst. 11(1) (1958) 54–55.

[2] J. Ding, A. Feng, X. Li, S. Ding, L. Liu, W. Ren, J. Phys. D: Appl. Phys. 54(17) (2021) 173002.



ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE RETENCIÓN SELECTIVA DE LITIO DE HIDRÓXIDO MIXTO DE Li/Al

V. Raimundi^{a,b*}, A. Gallinares^{a,b}, L.E. Mardones^{a,b}, J.E. Vega Castillo^{a,b}, A.F. Addato^a

^a YPF Tecnología S.A., Berisso, Provincia de Buenos Aires, Argentina

^b Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET, Argentina

*v.raimundi@ypftecnologia.com

Palabras claves: LITIO; DLE; HDL MIXTO; ALUMINIO; RETENCIÓN SELECTIVA

La extracción directa de litio (DLE, por sus siglas en inglés) representa una alternativa tecnológica de creciente interés frente a los métodos tradicionales basados en evaporación solar, particularmente en Argentina, donde las salmueras pueden presentar baja concentración de litio y los ecosistemas altoandinos son especialmente sensibles al uso intensivo de agua. En este contexto, la tecnología DLE por adsorción se posiciona como una de las más utilizadas a escala industrial debido a su selectividad, eficiencia y menor impacto ambiental [2], sumado a su relativa simplicidad operativa respecto de otras tecnologías de extracción directa de litio.

Entre los materiales adsorbentes estudiados para este fin, los hidróxidos dobles laminares (HDL) de litio y aluminio constituyen una familia de compuestos cristalinos con estructura laminar, formada por capas alternadas de octaedros AlO_6 y tetraedros AlO_4 . Los iones Li^+ son retenidos en los espacios interlaminares, mediante mecanismos de adsorción asociados a la densidad de carga y a la composición química del sólido [1]. Sin embargo, la capacidad de retención de litio de estos materiales depende fuertemente de su fórmula molecular, es decir, de la proporción entre cationes metálicos, la densidad de carga de las láminas y la cantidad de aniones interlaminares presentes. En este sentido, es necesario comprender y controlar su estructura a partir de las condiciones de síntesis.

Este trabajo se enfoca en estudiar la relación entre la fórmula del HDL Li/Al, su estructura cristalina y su capacidad de adsorción de litio, con el objetivo de identificar formulaciones activas y reproducibles en laboratorio. Para ello, se sintetizaron distintas muestras en condiciones controladas, las cuales se caracterizaron estructuralmente mediante difracción de rayos X (XRD) y cuya capacidad de retención fue probada a escala laboratorio con salmueras artificiales representativas. Se obtuvieron materiales con retenciones de hasta un 90 % de litio a 60 °C. Además, se llevó a cabo un tratamiento de reactivación sobre un HDL Li/Al inactivo, el cual permitió recuperar su capacidad de retención, alcanzando un 84 % de retención de litio a 60 °C.

Estos resultados destacan el potencial de los hidróxidos dobles laminares de litio y aluminio como materiales exitosos para su aplicación en procesos DLE, así como la importancia de su ajuste composicional y estructural, aportando herramientas para el diseño racional de adsorbentes aplicables a procesos de extracción directa de litio en el contexto argentino.

[1] D. Li, N. Zhang, D. Gao, Z. Zhuang, D. Zeng, ACS Materials Au, 4 (2023) 45–54.

[2] J. Zhong, S. Lin, J. Yu, Desalination, 505 (2021) 114983–114993.



SÍNTESIS DE LiF POR REACCIÓN SÓLIDO-SÓLIDO A TEMPERATURA AMBIENTE

A. Resentera^{a,b,c*}, J. Vega-Castillo^c, F. Saccone^c, M. Cozzarin^c, M. Rodríguez^b

^a Laboratorio de Metalurgia Extractiva y Síntesis de Materiales (MESiMat), Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB), UNCuyo-CONICET-FCEN, Padre Contreras 1300, CP 5500, Mendoza, Argentina.

^b Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNCuyo, Padre Contreras 1300, CP 5500, Mendoza, Argentina.

^c YPF Tecnología S.A., Av. Del Petróleo S/N (B1923), Berisso, Buenos Aires, Argentina.

*r_alex_07@hotmail.com

Palabras claves: FLUORURO DE LITIO, ESTADO SÓLIDO, Li₂CO₃, ELECTROLITO, LIB

El fluoruro de litio (LiF) es un compuesto de valor estratégico con excelentes propiedades térmicas, químicas y electroquímicas. Estas características lo han posicionado como un producto ampliamente empleado en óptica, dosimetría, metalurgia y sistemas de almacenamiento de energía [1]. Si bien los métodos convencionales de síntesis acuosa son simples, han sido criticados por su elevado consumo de agua y la generación de aguas residuales ácidas con elevados contenidos de flúor [2].

En este trabajo se propone un nuevo método de síntesis de LiF mediante la reacción directa entre Li₂CO₃ y NH₄F en estado sólido a temperatura ambiente. La Figura 1 presenta la evolución estructural (a) y la cuantificación de fases (b) de la mezcla Li₂CO₃:NH₄F en relación molar 1:2, monitorizadas a lo largo del tiempo mediante DRX y refinamiento de Rietveld. Los resultados revelan que el proceso ocurre mediante dos reacciones consecutivas. En primer lugar, una rápida formación de LiF y NH₄HCO₃ con liberación instantánea de NH_{3(g)}. El refinamiento del primer patrón de difracción indica una relación másica de 31% de LiF, 29% de NH₄HCO₃, 19% de Li₂CO₃ y 21% de NH₄F, en acuerdo con la reacción (1). Con el transcurso del tiempo, la intensidad de las reflexiones del LiF aumenta, mientras que las de los reactivos y el NH₄HCO₃ disminuyen gradualmente, indicando que la segunda etapa implica la descomposición de NH₄HCO₃ en CO_{2(g)}, H₂O_(g) y NH_{3(g)}, según la reacción (2). Tras 4 horas en un sistema estático, la conversión alcanzó una cantidad >90% de LiF, sin disolventes ni gasto energético. Finalmente, luego de 72 h el único producto sólido presente fue LiF. El análisis SEM mostró partículas de LiF con morfología pseudocúbica y tamaños de entre 80 y 300 nm, menores que las obtenidas mediante métodos convencionales. De esta manera, se obtiene un proceso que ofrece una alternativa limpia, sin consumo de agua y energéticamente más eficiente para la producción de LiF.

Cabe destacar que la cuantificación elemental mediante métodos analíticos clásicos no es aplicable, ya que la disolución de NH₄F acidifica el medio y precipita inmediatamente el LiF. Por ello, la cuantificación de fases por método de Rietveld ofrece una alternativa óptima para el proceso.

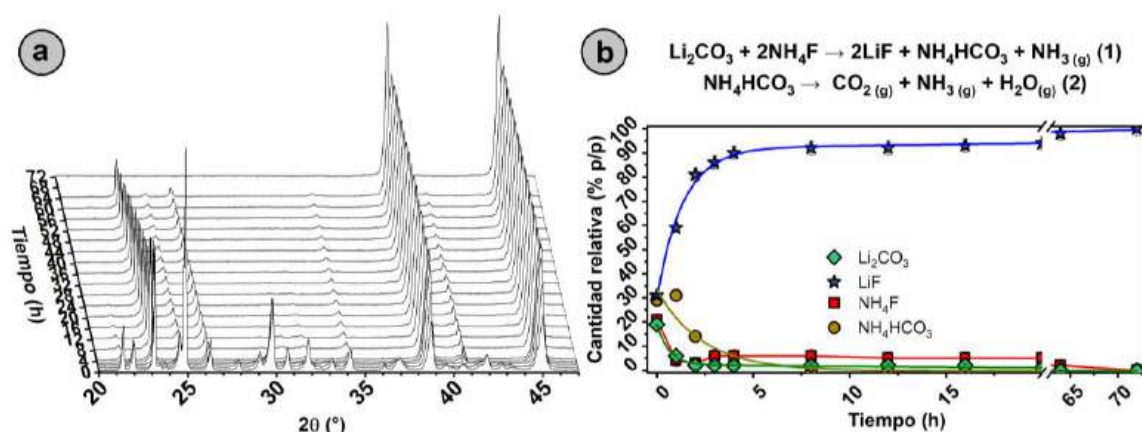


Figura 1. Patrones DRX de la mezcla Li₂CO₃/NH₄F y cuantificación por método Rietveld, en función del tiempo.

[1] U. Sharopov, T. Juraev, S. Kakhkhorov, K. Juraev, M. Kurbanov, M. Karimov, D. Saidov, A. Kakhramonov, F. Akbarova, I. Rakhmatshoev, O. Abdurakhmonov, Next Mater, 8 (2025) 100548.

[2] Z. Han, S. Wu, X. Wu, W. Guan, Z. Cao, Q. Li, M. Wang, G. Zhang, J. Environ. Chem. Eng. 11 (2023) 110557.

**DEGRADACIÓN ESTRUCTURAL INTERNA EN BATERIAS DE LITIO GRAFITO-NMC**T. Demergasso^a, G. Peñaranda^b, **A. Reviglio^{a*}**, R. Ponzio^a^a Departamento de Física, Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC).^b Laboratorio de Energías Sustentables (LaES), Universidad Nacional de Córdoba (UNC).

*areviglio@exa.unrc.edu.ar

Palabras claves: BATERIAS; LITIO; DEGRADACIÓN; XRD; GRAFITO; NMC

La degradación interna de las baterías de litio constituye uno de los principales factores que limitan su capacidad, eficiencia y vida útil [1]. Comprender cómo las condiciones de ciclado afectan la estructura cristalina de los electrodos es fundamental para optimizar su rendimiento y extender su durabilidad. En particular, el análisis de la estructura cristalina mediante difracción de rayos X (XRD) permite dilucidar los cambios a nivel atómico que acompañan a los procesos de degradación y, permitiendo estudiar los mecanismos involucrados [2].

En este trabajo se estudian baterías comerciales sometidas a ciclados de degradación a 10 °C, 20 °C y 45 °C. Tras la apertura de las celdas, se analizaron por separado los electrodos positivos (NMC) y negativos (grafito) mediante XRD. La Figura 1 presenta un ejemplo del patrón de difracción para las muestras nuevas y luego de una degradación a 45 °C.

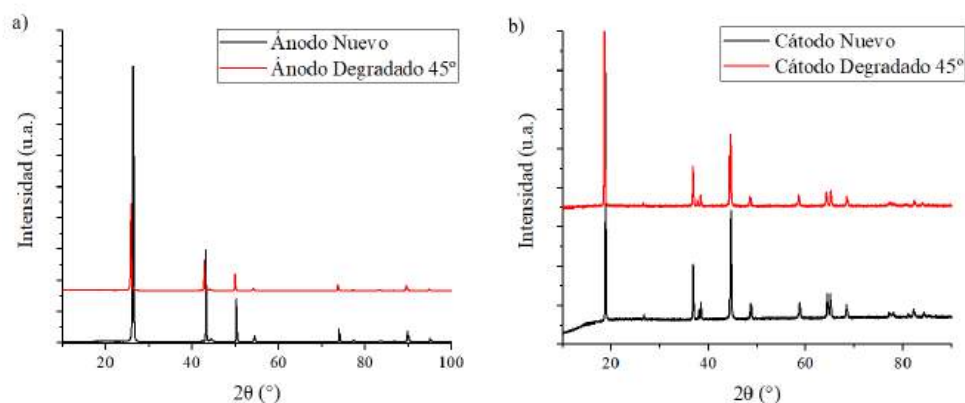


Figura 1. Difractogramas (a) ánodo de grafito y (b) cátodo de NMC nuevos y degradados.

En el análisis se empleó el cálculo teórico de los patrones de difracción, su comparación con los datos experimentales y el ajuste con bases de datos cristalográficas, con el objetivo de correlacionar las variaciones estructurales observadas con los procesos de deterioro electroquímico. Este estudio busca establecer relaciones entre la evolución cristalográfica y el desempeño de las baterías, contribuyendo al desarrollo de sistemas de almacenamiento de energía más estables y eficientes.

[1] T. Rahman, T. Alharbi, Batteries, 10(7) (2024) 220–252.

[2] W. Cheng, M. Zhao, Y. Lai, X. Wang, H. Liu, P. Xiao, G. Mo, B. Liu, Y. Liu, Exploration, 4(1) (2024) 20230056–20230074



INFILTRACIÓN DE Pd EN CÁTODOS DE $\text{SrCo}_{0.50}\text{Fe}_{0.45}\text{Ir}_{0.05}\text{O}_{3-\delta}$: IMPACTO EN LA PERFORMANCE DE SOFC OPERADAS CON HIDRÓGENO Y AMONÍACO

A. Alveal^{a,b}, Y. Mansilla^{b,c}, P.C. Rivas Rojas^{b,d*}, R. Loebel^a, V. Cascos^e, M. T. Fernández-Díaz^f, J.A. Alonso^g, L. Troncoso^{a,b}

^a Instituto de Ingeniería Mecánica, Universidad Austral de Chile, General Lagos 2086, 5111187, Valdivia, Chile

^b MIGA Millennium Institute (ICN 2021_2023), Chile

^c Dpto. de caracterización de materiales Centro Atómico de Bariloche, Avenida Bustillo 9500, Bariloche, 8400, Argentina

^d ITECA, UNSAM-CONICET/ECyT, Lab3Bio/Laboratorio de Cristalografía Aplicada, Pcia de Buenos Aires, Argentina

^e Departamento de Energía, CIEMAT, Av. Complutense 40, 28040 Madrid, España

^f Instituto Laue Langevin, BP 156X, F-38042 Grenoble, Francia

^g Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Cantoblanco, 28049 Madrid, España

*privasr@unsam.edu.ar

Palabras claves: CÁTODO; INFILTRACIÓN; IT-SOFC; DA-SOFC

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) son dispositivos electroquímicos muy eficientes para la generación de energía eléctrica, sin emisión de gases de efecto invernadero y versátiles en cuanto a la selección de combustible. Dos de los principales desafíos en su diseño son bajar la temperatura de operación y seleccionar materiales convenientes en función de costos, disponibilidad e impacto ambiental. En este sentido, disminuir la cantidad de Co es clave en el desarrollo de cátodos tipo Perovskita [1,2]. Adicionalmente, la incorporación de nanoestructuras en los electrodos de las SOFC se ha perfilado como una alternativa atractiva para incluir materiales con propiedades de interés como el Pd en cantidades pequeñas, maximizando el área superficial y su actividad catalítica. Finalmente, el amoníaco se sitúa como un vector de hidrógeno con excelente densidad energética, libre de C y una infraestructura de transporte y manejo bien establecida a nivel global, lo cual lo hace muy atractivo para ser usado directamente como combustible (DA-SOFC) [3].

En este trabajo se aborda el diseño, síntesis y caracterización de perovskitas de $\text{SrCo}_{0.50}\text{Fe}_{0.45}\text{Ir}_{0.05}\text{O}_{3-\delta}$, orientadas a su aplicación como cátodo en celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia (IT-SOFCs). Se redujo la proporción de Cobalto mediante la sustitución parcial por Hierro y adición de Iridio, lo que estabilizó la fase cúbica a $\sim 400^\circ\text{C}$. La caracterización estructural, realizada por XRD y NPD in situ ($25\text{--}800^\circ\text{C}$) reveló una estequiometría a 800°C de $\text{SrCo}_{0.50}\text{Fe}_{0.45}\text{Ir}_{0.05}\text{O}_{2.694(1)}$, y el análisis térmico una pérdida de masa del 1,585%.

La conductividad eléctrica se midió por el método de 4 puntas en pastillas rectangulares de la perovskita sin infiltrar, obteniéndose $39,44\text{ S/cm}$ a 800°C , y las medidas de espectroscopía de impedancia electroquímica en celdas simétricas con y sin infiltración de Pd revelaron una disminución de la resistencia de los procesos electroquímicos para la muestra infiltrada. Esto último se refleja en la performance electroquímica, estudiada en monoceldas con electrolito de LSGM (de $90\text{ }\mu\text{m}$ de espesor fabricadas por tape casting) y ánodo Ni-GDC alimentadas con H_2 y NH_3 . Los cátodos infiltrados con Pd mostraron mayor potencia, alcanzando 502 mW/cm^2 (H_2) y 422 mW/cm^2 (NH_3) a 800°C .

En base a estos resultados, el $\text{SrCo}_{0.50}\text{Fe}_{0.45}\text{Ir}_{0.05}\text{O}_{3-\delta}$ presenta características prometedoras como cátodo de SOFC, estable y de bajo costo para IT-SOFC. Combinado con los resultados obtenidos para la muestra infiltrada y operando directamente con amoníaco, suponen un sistema de gran interés partiendo del diseño y selección de materiales.

[1] V. Cascos, L. Troncoso A.L. Larralde, M.T. Fernández-Díaz, J.A. Alonso, ACS Appl. Energy Mater. 3(7) (2020) 6709–6716

[2] P.C. Rivas Rojas, M.D. Arce, C. Bertoli, A. Baruj, L. Moggi, L. Troncoso, Electrochim. Acta, 526 (2025) 146164.

[3] O. Elmutasim, S. Giddey, D.S. Dhawale, S. Bhattacharya, Int. J. Hydrogen Energy, 96 (2024) 192–209.



ANÁLISIS COMPOSICIONALES DE PINTURAS RUPESTRES DEL SUR DE PATAGONIA (CAMPO VOLCÁNICO PALI AIKE, SANTA CRUZ, ARGENTINA): PDRX Y SEM-EDAX SOBRE PIGMENTOS BLANCOS Y NEGROS

M. Rodríguez^{a*}, F. Di Salvo^a, M. Peluas^a, L. Manzi^b, P. Funes^b, M. S. Pereda^c, J. Charlin^d

^a INQUIMAE- CONICET, DQIAQF-FCEN -UBA

^b CONICET-IMHICIHU, UBA-FFyL

^c Laboratorio de Microscopía Electrónica - END – INTI

^d CONICET-CENPAT-IPCSH, IA-UBA-FFyL

*mgrodriguez@qi.fcen.uba.ar

Palabras clave: PIGMENTOS, PDRX, MOTIVOS RUPESTRES

En los últimos años, el estudio sistemático de las representaciones rupestres en el campo volcánico Pali Aike (CVPA) [1] se ha realizado empleando diversos análisis fisicoquímicos que han permitido identificar algunos de los pigmentos empleados en su confección. Investigaciones previas sobre pinturas rojas identificaron a la hematita como el principal mineral cromóforo utilizado para la elaboración de estos motivos, los cuales son mayoritarios en la región (más del 90%). Sin embargo, también se han detectado pinturas blancas y negras, de distribución minoritaria, cuyo origen mineral y composicional aún no se conoce con precisión.

En este trabajo se presentan los resultados obtenidos a partir del análisis de pigmentos blancos y negros provenientes de la localidad Meseta Bella Vista y el Alero Romario Barría (Figura 1). Las muestras fueron analizadas empleando Difracción de Rayos X de polvos (pDRX) y comparadas con patrones de difracción de bibliografía de los minerales relacionados con la coloración identificada. Estos resultados permitieron identificar el pigmento blanco de la pintura del positivo de manos con el oxalato de calcio dihidratado (weddelita), mientras que en el motivo de trazos largos con pigmento negro se identificaron varios minerales, entre ellos whewellita y weddelita (~47%), hematita (~31%), cuarzo (~21%) y grafito (~17%). Además, fragmentos de las muestras se evaluaron con la técnica SEM-EDAX, constatando los resultados obtenidos en la técnica de pDRX. A futuro, se prevé continuar con el análisis de estos pigmentos en diversos motivos identificados en sitios arqueológicos del CVPA, y realizar un análisis comparativo de las mezclas pigmentarias con muestras naturales de referencia (e.g. sedimentos de fondo de laguna, líquenes, resina de molle, etc.)

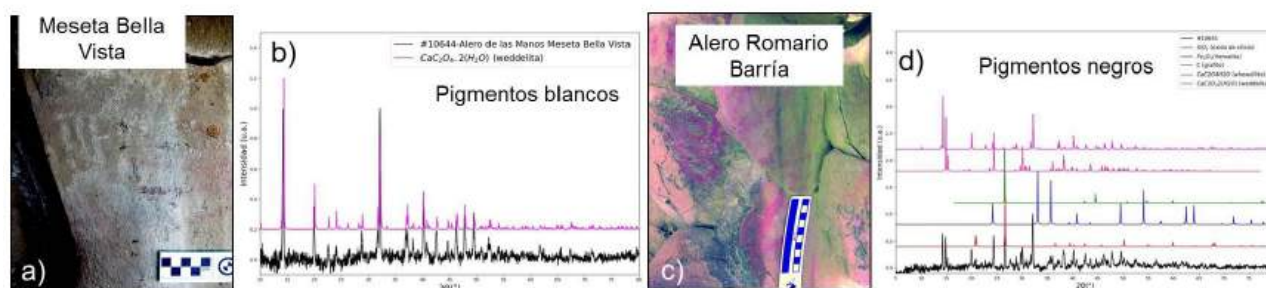


Figura 1. a) Positivo de mano en blanco de la localidad Meseta Bella Vista, Interfluvio de los ríos Gallegos-Chico, CVPA b) Difractograma del pigmento blanco extraído del motivo rupestre en comparación con el difractograma de oxalato de calcio dihidratado (weddelita) [2], c) Trazos paralelos largos en negro del sitio Alero Romario Barría, Río Gallegos, CVPA d) Difractograma del pigmento negro extraído del motivo rupestre en comparación con los difractogramas de diferentes compuestos de bibliografía [3].

[1] M. D'Orazio, S. Agostini, F. Mazzarini, F. Innocenti, P. Manetti, M.J. Haller, A. Lahsen, Tectonophysics, 321 (2000) 407–427

[2] de Wolff, P., Technisch Physische Dienst, Delft, The Netherlands. ICDD Grant-in-Aid.

[3] Natl. Bur. Stand. (U. S.) Monogr. 25 (1981), 18–61.



ANÁLISIS CRISTALOGRÁFICO PRELIMINAR DE MINERALES PESADOS EN ARENAS DE PLAYA PROVENIENTES DE CAMET NORTE-LA CALETA, BUENOS AIRES

M. Rodríguez^{a*}, R.A. Medina^b, A.L. Martínez^b, M.S. Pereda^c

^a INQUIMAE- CONICET, DQIAQF-FCEN -UBA

^b Depto. de Geología, FCEN, UBA

^c Laboratorio de Microscopía Electrónica - END - INTI

*mgrodriguez@qi.fcen.uba.ar

Palabras claves: ARENAS DE PLAYA; MINERALES PESADOS; ESTRUCTURA CRISTALINA

Los depósitos detríticos de hierro, titanio y circonio de las playas bonaerenses han sido estudiados desde fines de la década de 1920 con distintas finalidades [1]. El objetivo de este trabajo consiste en identificar los minerales pesados del sector de playa situado entre Camet Norte-La Caleta, a fin de comparar los resultados con estudios similares en otras playas bonaerenses y así poder determinar el área de procedencia de las arenas. De las muestras de arena se pudieron apartar tres tipos de cristales distintos con el objetivo de analizar su estructura cristalina y determinar el tipo de mineral (Fig. 1).

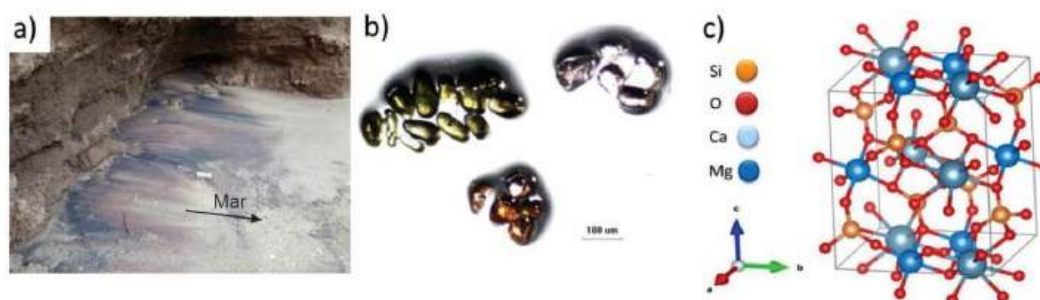


Figura 1. a) Sector de playa situado entre Camet Norte y La Caleta en donde se recolectaron las muestras de arena, pudiéndose observar la segregación mecánica por oleaje de los minerales magnéticos y pesados según sus respectivos pesos específicos, b) Cristales verdes, rosas y rojos aislados de una de las muestras, c) Estructura del cristal verde medido con SCDRX (figura realizada con el programa Vesta [2]).

Los cristales fueron analizados en un Difractómetro de monocristal (SCDRX) Gemini E (Oxford Diffraction-Rigaku) utilizando radiación de Mo, $K\alpha_1 = 0.71 \text{ \AA}$ y equipado con un detector de tecnología CCD [3]. Estos resultados permitieron identificar a los cristales rojos y rosas como almandino, perteneciente al grupo de los granates [4], mientras que los cristales verdes se identificaron como hornblenda, del grupo de los anfíboles [4]. Además, se evaluaron estos cristales con la técnica SEM-EDAX en el equipo Philips SEM 505 (INTI), constatando los resultados obtenidos en el SCDRX. De igual modo, en montajes de grano suelto analizados como cortes delgados bajo microscopio petrográfico se confirmó la presencia de granate y hornblenda en las muestras de arena analizadas.

Este tipo de análisis es pionero en el sector de playa estudiado. Granate y hornblenda ya habían sido identificados en otras playas de la provincia de Buenos Aires, si bien no el tipo de granate (almandino). La procedencia es compatible con las Sierras Septentrionales, al encontrar en esos afloramientos rocas con esta mineralogía. No obstante, será necesario identificar al resto de los minerales pesados a fin de descartar o no otras procedencias citadas en la bibliografía, tales como el sector norte de Patagonia o la Corriente de Malvinas.

[1] M.C. Cávana, M. Lanfranchini, M. Tessone, Relatorio del XVI Congreso Geológico Argentino, La Plata, Argentina, 2005, 375–385.

[2] K. Momma, F. Izumi, J. Appl. Crystallogr. 44 (2011) 1272–1276.

[3] <http://drx.qi.fcen.uba.ar/>

[4] C. Klein, C.S. Hurlbut, Manual de Mineralogía. Editorial Reverté, S.A., 750 p. Buenos Aires 2003.



CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL, MORFOLÓGICA Y FUNCIONAL DE ZnFe_2O_4 Y NiFe_2O_4 COMO QUIMIOSENSORES

O. Puebla Pérez^a, D. Tobia^{a,b,c}, P. Knoblauch^{a,c}, R.D. Sánchez^{a,b,c}, M.E. Saleta^{a,b,c*}

^a Instituto Balseiro, U.N. Cuyo – CNEA, S.C. de Bariloche, Argentina.

^a Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA-CONICET, S.C. de Bariloche, Argentina.

^c Centro Atómico Bariloche, CNEA, S.C. de Bariloche, Argentina.

* martin.saleta@ib.edu.ar

Palabras claves: QUIMIOSENSORES; EXAFS; ACETONA; ESPINELA

La detección de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) es un área en constante crecimiento dentro del desarrollo de materiales funcionales. En este trabajo se estudiaron las ferritas con estructura espinela ZnFe_2O_4 (ZFO) y NiFe_2O_4 (NFO), sintetizadas por el método de reacción del estado sólido, con el objetivo de evaluar su desempeño como materiales quimiosensores. Las muestras fueron caracterizadas estructural, morfológica y funcionalmente, enfocándose en su respuesta frente a vapores de agua y acetona.

El análisis estructural mediante difracción de rayos X de polvos (XRPD) confirmó en ambos casos la formación de la fase espinela (SG. Fd-3m) libre de fases espurias (Fig. 1). Se midieron espectros de absorción de rayos X (EXAFS) a temperatura ambiente. Los ajustes de datos de EXAFS permitieron estudiar el entorno local de los cationes absorbentes, corroborando la ocupación preferencial de los sitios tetraédricos por Zn^{2+} y de los octaédricos por Ni^{2+} .

Las micrografías obtenidas por microscopía electrónica de barrido mostraron una estructura granular y la espectroscopía de dispersión de energía (EDS) verificó la estequiometría esperada. La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) confirmó la presencia de enlaces característicos de la estructura espinela. Los espectros FTIR medidos en presencia de vapores de acetona y etanol mostraron desplazamientos en las bandas vibracionales, particularmente en 540 cm^{-1} (ZFO) y 560 cm^{-1} (NFO), posiblemente relacionados con distorsiones inducidas por la adsorción de moléculas, las cuales también se reflejan en las variaciones de resistencia eléctrica.

En las pruebas de sensado, ZFO (semiconductor tipo n) mostró una disminución de su resistencia frente a vapores de acetona y humedad, mientras que NFO (tipo p) presentó un aumento. Ambas ferritas respondieron a la presencia de humedad, aunque con limitada resolución frente a diferentes concentraciones. Se observó que a 300 °C mejora la sensibilidad hacia acetona, debido a una menor interferencia por humedad.

Estos resultados indican que ZFO y NFO son materiales promisorios para sensores de VOCs.

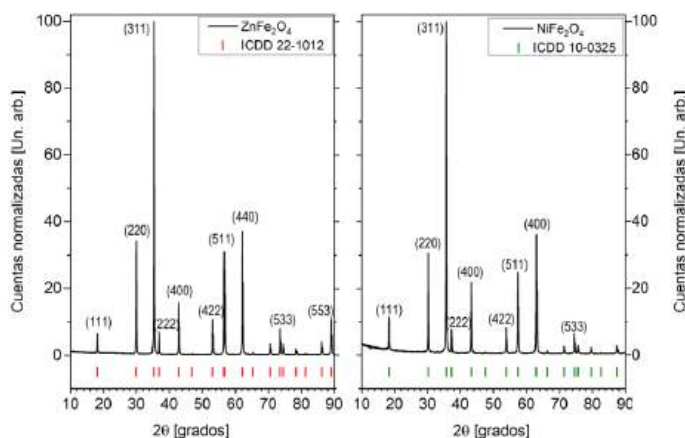


Figura 1. Patrones de XRPD de ZnFe_2O_4 (izq.) y NiFe_2O_4 (der.) confirmando la estructura espinela.



PEROVSKITA (Gd,La)Fe_{0.8}Ni_{0.2}O₃: PROPIEDADES ESTRUCTURALES, MAGNÉTICAS Y MAGNETOELÉCTRICAS

D. Velázquez Rodríguez^a, F.E. Lurgo^{a,b}, M.E. Saleta^{a,b,*}, R.D. Sánchez^{a,b}

^a Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET), Nodo Bariloche, S.C. Bariloche, Río Negro, Argentina.

^b Instituto Balseiro, U.N. Cuyo - CNEA, S.C. Bariloche, Río Negro, Argentina.

*martin.saleta@ib.edu.ar

Palabras claves: MULTIFERROICOS; XRD; ESTRUCTURA PEROVSKITA

Durante las últimas décadas, los materiales multiferroicos que exhiben propiedades magnéticas y eléctricas acopladas han atraído una atención significativa debido a sus potenciales aplicaciones en dispositivos electrónicos avanzados, sensores y sistemas de almacenamiento de memoria [1-3]. En este trabajo reportamos la síntesis exitosa y caracterización de muestras de (Gd, La)Fe_{0.8}Ni_{0.2}O₃, enfocándonos en sus propiedades estructurales, morfológicas, magnéticas y magnetoeléctricas.

Las muestras de (Gd, La)Fe_{0.8}Ni_{0.2}O₃ fueron sintetizadas mediante el método sol-gel, que proporciona un excelente control composicional y homogeneidad a nivel molecular. El análisis de difracción de rayos X (XRD) confirmó una estructura perovskita ortorrómbica, indicando la formación exitosa de fases y ordenamiento cristalino. La caracterización morfológica fue realizada usando microscopía electrónica de barrido (SEM), que reveló la microestructura superficial y permitió la determinación de la distribución del tamaño de grano. En el caso de la muestra de GdFe_{0.8}Ni_{0.2}O₃, la caracterización magnética reveló un comportamiento magnético complejo que surge de las diferentes subredes magnéticas presentes en la muestra. La subred Fe-Ni exhibió comportamiento ferrimagnético, resultando en un momento magnético neto, en contraste, la subred Gd³⁺ (4f⁷) mostró un comportamiento paramagnético tipo Curie, con momentos magnéticos que se alinean con campos magnéticos aplicados, pero no muestran ordenamiento magnético de largo alcance. Como era de esperar, la muestra LaFe_{0.8}Ni_{0.2}O₃ (La³⁺: 5d⁰) presenta solo la contribución ferrimagnética proveniente de la subred Fe-Ni.

Por su parte, las mediciones de acoplamiento magnetoeléctrico combinadas con espectroscopia de impedancia compleja evidencian el acoplamiento entre las fases eléctricas y magnéticas en el sistema (Gd,L a)Fe_{0.8}Ni_{0.2}O₃. El análisis de impedancia compleja reveló la respuesta eléctrica del material, mientras que las mediciones magnetoeléctricas demostraron cómo el campo magnético influye en las propiedades eléctricas y viceversa. Este acoplamiento es fundamental para aplicaciones multiferroicas y representa el hallazgo clave de esta investigación.

Los resultados demuestran que la perovskita (Gd,L a)Fe_{0.8}Ni_{0.2}O₃ sintetizada por sol-gel exhibe propiedades multiferroicas prometedoras con respuestas magnéticas y eléctricas acopladas. La coexistencia de subredes ferrimagnéticas y paramagnéticas, combinada con el acoplamiento magnetoeléctrico establecido, hace de este material un candidato potencial para dispositivos multiferroicos de próxima generación. El trabajo futuro se enfocará en optimizar las condiciones de síntesis para mejorar la fuerza del acoplamiento magnetoeléctrico y explorar aplicaciones potenciales de dispositivos.

[1] M.M. Vopson, Crit. Rev. Solid State Mater. Sci., 40(4) (2015) 223–250.

[2] W. Eerenstein, N.D. Mathur, J.F. Scott, Nature, 442 (2006) 759–765.

[3] M. Fiebig, T. Lottermoser, D. Meier, M. Trassin, Nat. Rev. Mater. 1 (2016) 16046.



EVOLUCIÓN ESTRUCTURAL DE UNA ARCILLA ROJA DE SAN LUIS DURANTE LA CALCINACIÓN: UN ESTUDIO POR DRX

D. B. Tagua^{a*}, J.A. González^a, B.P. Barbero^a

^a Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI), CONICET - Universidad Nacional de San Luis. Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia.

*deborabelentagua@gmail.com

Palabras claves: TRANSFORMACIONES MINERALÓGICAS, DESHIDROXILACIÓN, METACAOLINITA

La calcinación de arcillas naturales es una estrategia clave para ajustar sus propiedades texturales y estructurales en vistas a diferentes aplicaciones. En este trabajo se estudió la evolución mineralógica de una arcilla roja de la provincia de San Luis (Argentina), la cual se estructurará bajo la forma de espuma cerámica para ser usada como catalizador heterogéneo en reacción tipo Fenton en medio acuoso. Por lo tanto, se requiere determinar la temperatura de calcinación que garantice el sinterizado de la arcilla con mínima pérdida de área superficial. El seguimiento de las transformaciones cristalinas hasta 900 °C se realizó mediante DRX [1,2], y se complementó con análisis térmicos (TGA-DSC), FTIR y determinación de área superficial BET (S_{BET}). La arcilla natural es una mezcla de montmorillonita (PDF 00-013-0135), caolinita (PDF 01-078-2110) e illita (PDF 00-026-0911), junto a minerales minoritarios: calcita (PDF 01-086-2334), cuarzo (PDF 01-087-2069) y feldespatos (microclino, PDF 00-019-0932; albita, PDF 01-089-8574). Los DRX de la arcilla calcinada a diferentes temperaturas (Figura 1) mostraron que a $T \leq 200$ °C ocurre una disminución de la intensidad de las reflexiones basales de la montmorillonita, atribuida a la pérdida de agua interlaminar, en acuerdo con la pérdida de masa en la curva de TGA y la señal endotérmica en DSC. Entre 450 y 600 °C se observó la transformación de la caolinita a metacaolinita amorfa, debido al proceso de deshidroxilación. A la vez, la montmorillonita pierde su orden cristalino y persiste la illita. Las reflexiones de calcita desaparecen a 750 °C, en línea con una pérdida de masa en TGA. Por encima de 850 °C, se detectó la formación de hematita [2]. Las transformaciones se correlacionaron con los eventos de TGA-DSC y cambios en los espectros FTIR. Como es esperable, la S_{BET} disminuyó notablemente con el aumento de la temperatura de calcinación. En conjunto, estos resultados permiten establecer un rango de temperatura de calcinación de 600–750 °C en el cual la arcilla sinteriza sin pérdida total de la S_{BET} , manteniendo defectos estructurales que pueden ser catalíticamente relevantes.

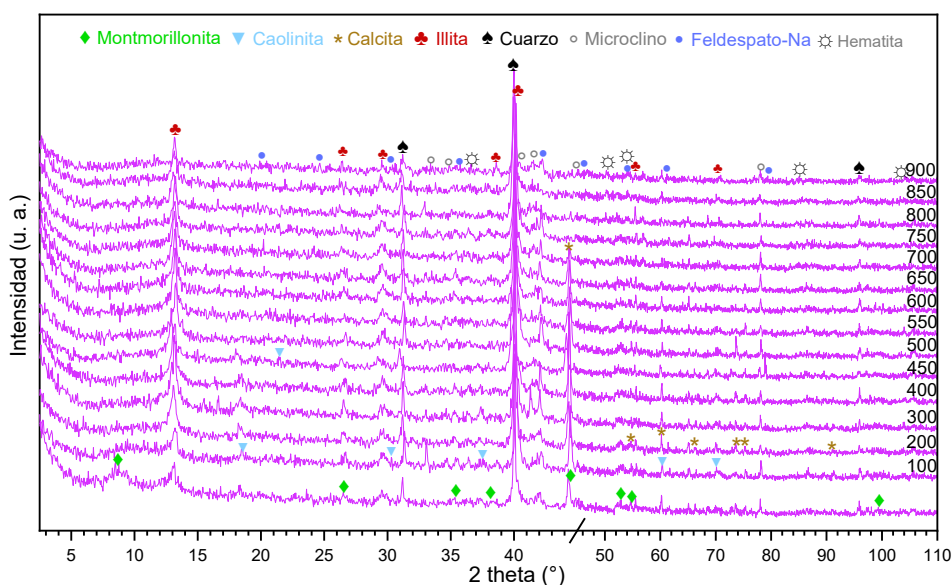


Figura 1. DRX de la arcilla calcinada a diferentes temperaturas.

[1] R. Huang, L. Wu, X. Wang, N. Tang, L. Gao, A. Wang, Y. Lu. Prog. Nat. Sci.: Mater. Int., 34 (2024) 251–262.

[2] G. W. Brindley. Clays Clay Miner. 1, (1952) 119–129.



MATERIALES CON ESTRUCTURAS TIPO – NASICON CON POSIBLE APLICACIÓN COMO ELECTROLITOS SÓLIDOS

S. Terny^{1*}, M.A. Frechero¹

¹ Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur (UNS), INQUISUR- CONICET, Av. Alem 1253, Bahía Blanca, C.P. 8000, Argentina

*soledad.terny@uns.edu.ar

Palabras claves: NASICON; CIRCONIA; ELCTROLITO SOLIDO

Un gran número de materiales han sido sugeridos como candidatos para ser utilizados en baterías de ion sodio. Dada la alta movilidad de iones Na^+ dentro de la red tridimensional romboédrica con estructura R3c, el material tipo NASICON, el $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ se destaca dentro de este grupo de materiales. Debido a su estructura cristalina única y a la posibilidad que presenta de generar diferentes sustituciones iónicas, la familia de compuestos NZP es elegida dado que presenta baja expansión térmica, alta conductividad iónica, alta estabilidad química y alta resistencia a las radiaciones [1].

En el presente trabajo, se propuso el dopado del $x\text{-NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$, con iones de diferente carga y tamaño, siendo x : Nb^{+5} y Mo^{+6} (Fig.1). La posible sustitución aniónica del ion fosfato por los iones mencionados anteriormente fue estudiada. Los nuevos materiales fueron sintetizados mediante el método de estado sólido (SSR) y sol-gel, y caracterizados estructural y eléctricamente mediante diversas técnicas como DRX, FTIR, RAMAN CONFOCAL, SEM-EDX y EIS.

Principalmente, se buscó comprender el rol de los dopantes en la estructura, y como se ven afectadas principalmente las propiedades eléctricas de los materiales. Dado que, con el dopaje con Nb^{+5} los valores de conductividad obtenidos fueron superiores a los obtenidos con Mo^{+6} , se prosiguió estudiando el sistema para diferentes cantidades de Nb^{+5} (x : 0.1, 0.3 y 0.5). Finalmente, se comprobó que la sustitución aniónica próspera para ambos iones, siendo el sistema con Nb^{+5} , el que presenta valores de conductividad más prometedores para su uso como electrolito sólido en baterías de estado sólido.

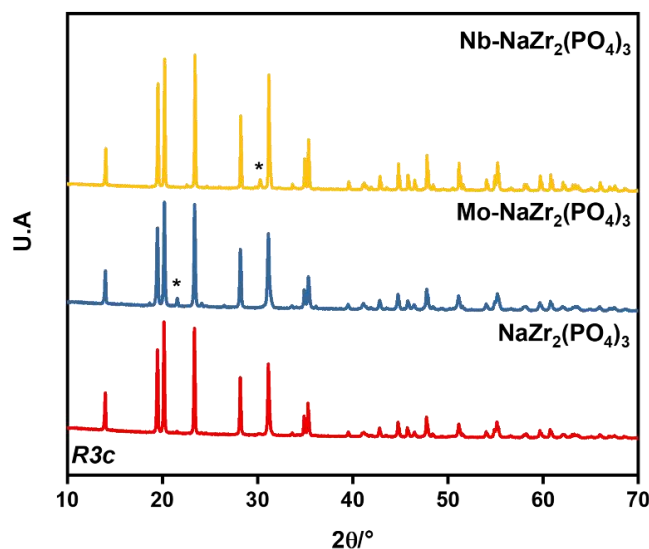


Figura 1. Difractogramas de la muestra preparadas por el método de SSR.

[1] S. Terny, R. Salgado, M.A. Frechero, J. Mater. Sci. 60 (2025) 367–382.



EVOLUCIÓN ESTRUCTURAL Y MAGNÉTICA EN ÓXIDOS MIXTOS $\text{Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{2-x/2}$ OBTENIDOS POR DENITRACIÓN TERMOQUÍMICA

D. Tobia^{a,b,c,*}, A. Fernández Zuvich^d, F.J. Castro^{c,e}, E.L. Winkler^{a,b,c}, A.M. Bevilacqua^d

^a Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (INN), CNEA-CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, 8400 S. C. de Bariloche (RN), Argentina.

^b Departamento Magnetismo y Materiales Magnéticos, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, 8400 S. C. de Bariloche (RN), Argentina

^c Instituto Balseiro, U.N. Cuyo, Avenida Bustillo 9500, 8400 S. C. de Bariloche (RN), Argentina.

^d Programa Nacional de Gestión de Residuos Radiactivos (PNGRR), CNEA, CAB, S. C. de Bariloche (RN), Argentina

^e CONICET, Avenida Bustillo 9500, 8400 S. C. de Bariloche (RN), Argentina

*dinatobia@integra.cnea.gob.ar

Palabras claves: CERIA DOPADA CON Gd; METAESTABILIDAD; DIFRACCIÓN DE RAYOS-X; RESONANCIA PARAMAGNÉTICA ELECTRÓNICA

La ceria (CeO_2) dopada con Gd es un material de gran interés para diversas aplicaciones tecnológicas como celdas de combustible de estado sólido, catálisis y dispositivos energéticos. Además, al ser isoestructural con el dióxido de uranio (UO_2), el sistema $\text{CeO}_2\text{--Gd}_2\text{O}_3$ resulta un modelo ideal para estudiar el sistema $\text{UO}_2\text{--Gd}_2\text{O}_3$, relevante en aplicaciones nucleares por el rol del Gd como absorbedor quemable. Esto permite explorar efectos de la sustitución de Gd en el sistema evitando la manipulación del material combustible nuclear. Adicionalmente el ion Gd^{3+} es particularmente adecuado para explorar modificaciones estructurales y correlaciones magnéticas mediante resonancia paramagnética electrónica (EPR) y magnetización.

En este trabajo se estudiaron óxidos mixtos de $\text{Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{2-x/2}$ ($x = 0.1\text{--}0.9$) sintetizados por un novedoso método de desnitración termoquímica, que convierte nitratos en óxidos en un solo paso a baja temperatura, sin generar efluentes y produciendo polvos homogéneos de tamaño submicrónico. [1] Los difractogramas de rayos X (DRX) mostraron solubilidad mutua de Ce y Gd en las estructuras fluorita y bixbyita, respectivamente, y ausencia de coexistencia clara de fases en el rango estudiado, lo que sugiere metaestabilidad.

Las mediciones de EPR revelaron para $x > 0.5$ una única señal lorentziana, mientras que para $x < 0.5$ se observan dos contribuciones, las que podrían estar asociadas a iones de Gd localizados en distintos entornos cristalográficos. Tras tratamientos térmicos a $1400\text{ }^\circ\text{C}$ se detectaron modificaciones en los parámetros de red en la región $x \approx 0.4\text{--}0.6$ y cambios significativos en una de las señales de EPR. Posteriormente, los refinamientos de DRX de muestras recocidas a $1600\text{ }^\circ\text{C}$ indicaron que en composiciones con 50–70% de Ce podrían coexistir fases fluorita y bixbyita, aunque la similitud estructural dificulta su discriminación. Estos resultados confirman la eficacia del método de síntesis y aportan evidencia sobre la evolución estructural y magnética del sistema, sugiriendo la posible existencia de estados metaestables y zonas de coexistencia de fases a altas temperaturas.

[1] “Método para la obtención de cenizas nanoparticuladas de óxidos de actínidos, lantánidos, metales y no metales provenientes de una solución de nitratos o suspensión de nitratos, óxidos, metales y no metales”. Inventores: A. Fernández Zuvich, A.M. Bevilacqua, A.L. Soldati, S.G. Pérez Fornells, H.A. Zolotucho, C.J.R. González Oliver, N. Silin. Instituto Nacional de la Propiedad Industrial (INPI). 2021 (AR115805A1; CNEA/CONICET).



ESTRUCTURA CRISTALINA Y PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LAS NUEVAS PEROVSKITAS $\text{TmFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$

M. Vivas Arellano^{a*}, F.E. Lurgo^b, J.M. De Paoli^a, R.D. Sánchez^b, R.E. Carbonio^a

^a INFIQC (UNC-CONICET), Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina.

^b Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET). Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica e Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo 8400 San Carlos de Bariloche (RN), Argentina.

*manuel.arellano@unc.edu.ar

Palabras claves: DIFRACCIÓN DE RAYOS X; PEROVSKITA; MAGNETISMO

Los óxidos tipo perovskita con la fórmula general ABO_3 exhiben una amplia variedad de propiedades, lo que los convierte en sistemas ideales para explorar las relaciones estructura-propiedad. En particular, los compuestos RMO_3 (R = tierra rara, M = metal de transición de la primera serie) son conocidos por sus complejas interacciones magnéticas que involucran electrones 3d y 4f, como se observa en las bien estudiadas ortoferritas (RFeO_3) [1] y ortocobaltitas (RCoO_3) [2]. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización, tanto estructural como magnética, de la serie de Perovskitas $\text{TmFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ ($0,1 \leq x \leq 1$).

Las muestras se sintetizaron a través del método sol-gel [3]. Aquellas con alto contenido de Co ($x \geq 0,6$) se obtuvieron a 1000°C utilizando una presión de oxígeno de alta pureza de 100 bar durante 12 h, mientras que las ricas en Fe ($x \leq 0,4$) se lograron a 1100°C en aire por 12 h. Todas estas muestras se analizaron por medio de difracción de rayos X de polvo de laboratorio y se obtuvieron con un alto grado de pureza ($> 98\%$).

El refinamiento de las estructuras cristalinas se llevó a cabo mediante análisis Rietveld, utilizando el programa FULLPROF. Se confirmó que todas las composiciones pertenecen al grupo espacial ortorrómbico $Pbnm$ (#62), con ocupación aleatoria de iones $\text{Fe}^{3+}/\text{Co}^{3+}$ en el sitio octaédrico 4b. El volumen de la celda unidad (Fig. 1) y las distancias medias de enlace $\langle\text{Tm-O}\rangle$ y $\langle\text{M-O}\rangle$ disminuyen conforme aumenta el contenido de Co^{3+} , como se esperaba debido a la diferencia de los radios iónicos (Fe^{3+} : 0,785 Å y Co^{3+} (LS): 0,685 Å). Los ángulos de giro de los octaedros $\delta 1$ y $\delta 2$ también disminuyen ligeramente con el incremento del valor de x .

Las mediciones magnéticas se realizaron utilizando un magnetómetro SQUID. Se obtuvieron curvas M vs T (ZFC-FC), de 5 a 300 K a 5 kOe de campo aplicado y se realizaron ciclos de magnetización isotérmica de -7 a $+7$ T a 20 K para todas las composiciones. Las muestras con alto contenido de Fe presentan un comportamiento antiferromagnético y una posible reorientación de espín en el intervalo 40-80 K. Con el aumento del contenido de Co, el ordenamiento magnético disminuye de manera continua y en las composiciones cercanas a TmCoO_3 ($x = 0,8$ y $0,9$) desaparecen las transiciones magnéticas, predominando un carácter paramagnético.

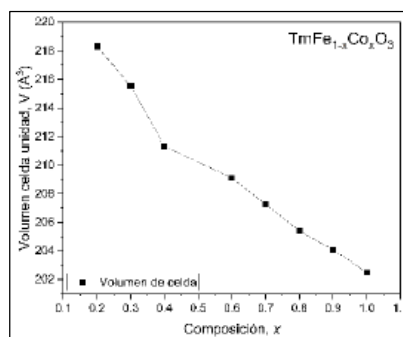


Figura 1. Variación del volumen de la celda unidad en función del valor de x para la serie de perovskitas ortorrómbicas $\text{TmFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$.

[1] R.L. White, J. Appl. Phys. 40 (1969) 1061.

[2] J.A. Alonso, M.J. Martínez-Lope, C. de la Calle, V. Pomjakushin, J. Mater. Chem. 16 (2006) 1555.

[3] F. Pomiro, R.D. Sánchez, G. Cuello, A. Maignan, C. Martin, R.E. Carbonio, Phys. Rev. B, 94 (2016) 134402.



ESTUDIO DE NANOPARTÍCULAS DE Ag EN EL ESPACIO REAL Y RECÍPROCO MEDIANTE MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN

F. Allende^a, H. Zarragoicochea^a, J.C. Azcárate^b, E. Zelaya^{b,c*}

^a Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Av. Bustillo 9500, Bariloche 8400, Río Negro, Argentina.

^b Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, Bariloche 8400, Río Negro, Argentina, CONICET.

^c CNEA.

*eugeniazelaya@cnea.gob.ar

Palabras claves: TEM; HRTEM; PDF; NANOPARTÍCULAS Ag.

Estudios combinados exploran la estructura de nano-partículas de plata (AgNPs) utilizando la microscopía electrónica de transmisión (TEM), una técnica que permite analizar materiales tanto en el espacio real (imágenes directas) como en el recíproco (patrones de difracción) [1]. Ambos enfoques se centran en la complejidad de la nanoescala y la necesidad de herramientas de análisis avanzadas.

A través del enfoque combinado de microscopía electrónica de transmisión (TEM), este estudio analizó la estructura de nano-partículas de plata (AgNPs) de diferentes formas. En los nanoplatos de plata (NPLsAg), se confirmó la coexistencia de dos fases cristalinas: la cúbica (Fm3m) y la hexagonal (P63/mmc), atribuida a fallas de apilamiento típicas de los materiales a nanoescala. Para interpretar las complejas imágenes de alta resolución (HRTEM), se utilizaron simulaciones computacionales con los módulos ase y abTEM de Python incorporando la función de transferencia de contraste del microscopio Thermo Fisher cm200UT. Estas simulaciones tienen en cuenta: el valor de defoco, la orientación relativa y la disposición de las fallas de apilamiento. (figura a b y c)

Por otro lado, la Función de Distribución de Pares (PDF), obtenida a partir de patrones de difracción, reveló información estructural detallada. Este análisis mostró la influencia del sustrato de formvar, cuyas distancias de enlace (C-C, C-H) generaron picos de fondo. Además, se detectó una contracción de la red en las nano-partículas en comparación con Ag “bulk”, un hallazgo significativo en la nanoescala (figura d). Este trabajo subraya la importancia de combinar técnicas experimentales y simulaciones para comprender las estructuras complejas de los nano-materiales.

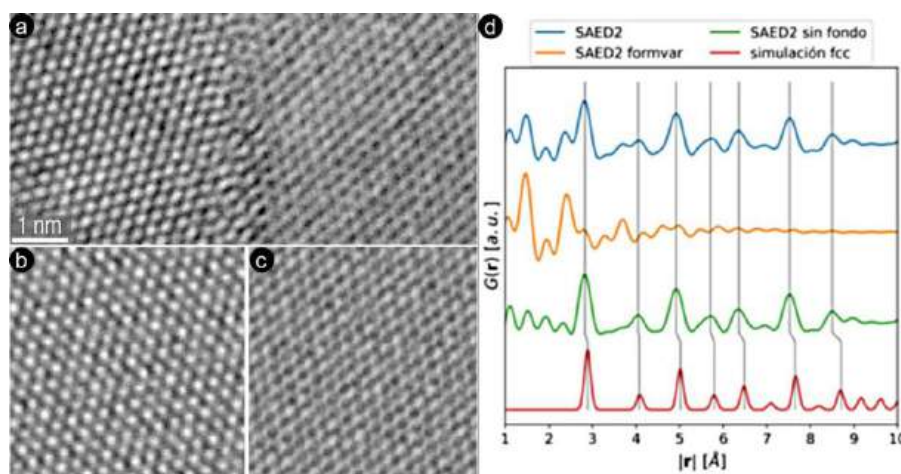


Figura 1a. Zoom de la zona de coalescencia. Se observan columnas atómicas con diferente contraste. b. y c.

Simulaciones HRTEM de ambas zonas teniendo en cuenta el carbono amorfo de la grilla de TEM que sostiene los NPLsAg. d. Comparación de la función de distribución de pares obtenidas de las muestras de nanopartículas esféricas de Ag, cuyos patrones de difracción fueron tomados con una apertura de selección de área de 200 μm con y sin la substracción del fondo, y con las simulaciones de una estructura FCC de Ag.

[1] D. B. Williams and C. B. Carter. Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science. Springer US, 2009.



SYNTHESIS, SINGLE CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION AND CHARACTERIZATION OF MIL-78(Nd)

E.L. Gutiérrez^a, O. Seel^a, L. Alaniz^a, P.H. Santiago^b, J.E. Ellena^b, **M.C. Bernini^{a*}**

^a Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI, CONICET–UNSL), San Luis, Argentina.

^b Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil.

* celeste.bernini@gmail.com

Keywords: LANTHANIDES; MOFs; SINGLE-CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

Metal-Organic Frameworks (MOFs) are a class of coordination compounds which are generally crystalline and are typically constructed from metal ions self-assembled with multifunctional organic ligands, giving rise to periodic polymeric networks containing accessible free volume [1]. MOFs are multifunctional materials with a broad spectrum of applications, including heterogeneous catalysis, luminescence, gas adsorption and separation, as well as environmental and wastewater remediation [2]. A family of Lanthanide-trimesate (BTC^{3-}) frameworks named as MIL-78 (*Matériaux de l'Institut Lavoisier*) was studied by synchrotron powder X-ray diffraction as it was reported by Serre *et al.* [3]. However, nowadays, no single-crystal X-ray diffraction data for such type of MOF architecture is present in the CSD of the CCDC, where +100000 MOF-like crystal structures are deposited [4].

In this work, we reported for the first time the single-crystal structure of the MIL-78(Nd) compound determined by a Rigaku Synergy-S diffractometer, at 100 K and Mo-radiation. MIL-78(Nd) single crystals were synthesized by the solvothermal method in water at 130 °C. MIL-78(Nd) crystallizes in the $C2/m$ (12) space group, with cell parameters $a = 11.5289(3)$ Å, $b = 18.0383(7)$ Å, $c = 7.3507(3)$ Å, $\beta = 119.5680(10)^\circ$, $V = 1329.59$ Å³. The asymmetric unit of MIL-78(Nd) comprises one BTC^{3-} anion and one Nd^{3+} cation. The coordination number of Nd^{3+} ion is 8 and the geometry corresponds to a square antiprism (Fig. 1a), the BTC^{3-} ligand exhibit a coordination mode as displayed in Fig. 1b; a view of the crystal packing of MIL-78(Nd) is shown in Fig. 1c. By using Topos.Pro 5.5.2 program [6], the standard simplification procedure allows for describing the structure as uninodal net, composed by 6-connected nodes located on the metal center (Fig. 1d) and on the organic linker (Fig. 1e), giving a topological type: $6/4/t7$; sqc885 (Fig. 1f). Complementary solid-state characterization is been carried out in order to fully characterize this material and to further explore future applications.

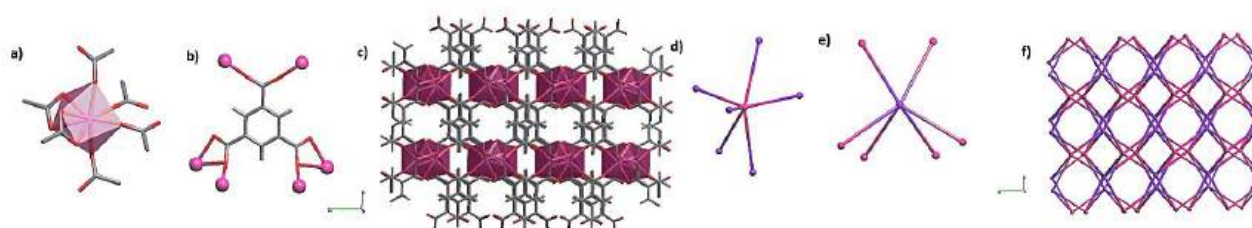


Figure 1. a) Coordination polyhedra of Nd^{3+} ions; b) coordination modes of BTC linkers, projection of the MOF structure along the [100] direction; 6-connected nodes d) and e) obtained by Standard simplification procedure by means of ToposPro 5.5.2 and Simplified Net with $6/4/t7$; sqc885 topological type.

[1] S.R. Batten, N.R. Champness, X.-M. Chen, J. García-Martínez, S. Kitagawa, L. Öhrström, M. O’Keeffe, M.P. Suh, J. Reedijk, *Pure Appl. Chem.*, 85(8) (2013) 1715–1724.

[2] R.E. Sikma, K.S. Butler, D.J. Vogel, J.A. Harvey, D.F. Sava Gallis, *J. Am. Chem. Soc.*, 146(9) (2024) 5715–5734.

[3] C. Serre, F. Millange, C. Thouvenot, N. Gardant, F. Pellé, G. Férey, *J. Mater. Chem.*, 14 (2004) 1540–1543.

[4] <https://support.ccdc.cam.ac.uk/support/solutions/articles/103000306242-how-many-mofs-are-there-in-the-csd->



ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL DEL MESILATO DE TIOCONAZOL. CARACTERIZACIÓN TÉRMICA Y ESPECTROSCÓPICA

N.L. Calvo,^{a*} A.B. Moroni,^a D.F. Lionello,^b D.R. Vega,^b T.S. Kaufman^a

^aInstituto de Química Rosario (IQUIR-CONICET), Rosario, 2000, Argentina; ^bDepartamento Física de la Materia Condensada, Centro Atómico Constituyentes (CNEA), Buenos Aires, 1650, Argentina

*calvo@iquir-conicet.gov.ar

Palabras claves: TIOCONAZOL; SALES FARMACÉUTICAS; DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL

Tioconazol (TCZ) es un reconocido antifúngico, encuadrado como Clase II del Sistema de Clasificación Biofarmacéutica [1], es decir, de baja solubilidad y alta permeabilidad. Buscando aumentar la solubilidad acuosa del fármaco, se preparó el mesilato de TCZ (TCZ•Ms) y se obtuvieron, por primera vez, monocristales aptos para realizar difracción de rayos X de monocristal (SCXRD) y elucidar la estructura cristalina de la sal. Además, se amplió la caracterización del sólido por difracción de rayos X de polvo (PXRD), calorimetría diferencial de barrido (DSC), análisis termogravimétrico (TGA) y espectroscopía en el infrarrojo (NIR, MIR).

La estructura de TCZ•Ms se resolvió y refinó en el grupo espacial monoclinico C2/c y Z = 8, con parámetros de celda: a = 37,864(4) Å, b = 6,0155(6) Å, c = 18,7413(19) Å, $\alpha = 90,0^\circ$, $\beta = 102,146(9)^\circ$, $\gamma = 90,0^\circ$ y V = 4173,2(7) Å³. La fase es anhidra, consta de un par iónico TCZH⁺•Ms⁻ cristalográficamente independiente en la unidad asimétrica y mostró desorden sobre el anillo isocíclico y los tres átomos de cloro a temperatura ambiente. Los contraiones están asociados por puentes de hidrogeno bifurcados N⁺—H···O⁻, donde intervienen el N protonado del imidazol y dos O del mesilato, asistidos por carga (Figura 1). Una red tridimensional de puentes de hidrógeno entre aniones y cationes e interacciones entre ambos consolidan la estructura.

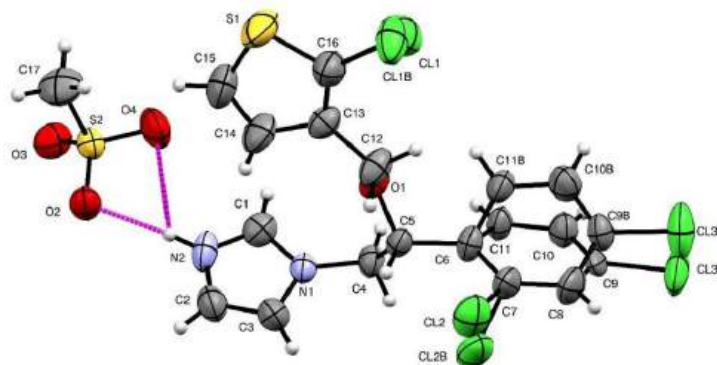


Figura 1. Unidad asimétrica de TCZ•Ms. Los enlaces de hidrógeno se muestran con líneas de color magenta (—).

La plena concordancia entre los difractogramas del granel y del teórico calculado a partir de SCXRD, confirmaron la homogeneidad y pureza de la fase. El análisis TGA confirmó que TCZ•Ms es anhidro y las curvas de DSC (T_{onset} : 191,5°C) indicaron que presenta mejor estabilidad térmica que TCZ (T_{onset} : 79,1°C). Además, los espectros de la sal en el infrarrojo medio (MIR) y cercano (NIR) mostraron bandas diferenciales útiles para la identificación inequívoca del compuesto con respecto a sus componentes individuales.

En conclusión, se caracterizó, resolvió y refinó con éxito la estructura cristalina de TCZ•Ms. Además, se observó que el sólido exhibió mejor estabilidad térmica que TCZ, lo cual demostraría su potencial valioso para el desarrollo de un principio activo con perfil funcional mejorado y formulaciones farmacéuticas más eficaces.

[1] M.I. Qureshi, Q.A. Jamil, F. Usman, T.A. Wani, M. Farooq, H.S. Shah, H. Ahmad, R. Khalil, M. Sajjad, S. Zargar, S. Kausar, Gels, 9 (2023) 767.



NUCLEARIDAD DE CLUSTERS Co(III)/Dy(III) CONTROLADA POR EL SOLVENTE

F.D. Cukiernik^{a*}, N. Coutard^{a,b}, N. Vadra^{a,c}, P. Albores^a

^a INQUIMA/Conicet-UBA y DQIAQF/FCEN/UBA – Pabellón II – Cdad. Universitaria – Nuñez – 1428 – CABA

^b actualmente: ECPM-Strasbourg – Francia

^c actualmente: University Adam Mickiewicz – Poznan - Polonia

*fabio.cukiernik.inorganica@gmail.com

Palabras clave: MAGNETOS DE MOLECULA UNICA; CLUSTERS; NUCLEARIDAD; DISPROSIO; ESTRUCTURA

En el campo de los magnetos de molécula única (SMM) [1], la familia de los compuestos basados en *clusters* tetranucleares Co₂(III)/Dy₂(III) de estructura *butterfly* (con ligandos acetato o pivalato y dietanolamina) ha sido extensamente estudiada, y presenta tiempos de relajación magnética interesantes en el camino hacia su potencial uso en dispositivos de almacenamiento de datos [2]. Si bien las condiciones de síntesis/cristalización para obtener este tipo de *clusters* están bastante firmemente establecidas para los ligandos mencionados, cuando se utilizan ligandos diferentes, se obtienen *clusters* de diversa nuclearidad. Recientemente, utilizando dietanolaminas de cadena larga, obtuvimos tanto *clusters butterfly* Co₂/Dy₂ como hexanucleares Co₃/Dy₃. [3] La obtención de unos u otros parece depender tanto de las condiciones de cristalización como de la longitud de cadena.

En este trabajo, utilizamos una dietanolamina de cadena muy corta, y 3,5-di(metoxi)benzoato como ligando carboxílico. El solvente de cristalización resultó el factor controlante del tipo de *clusters* formados: en efecto, en mezclas metanol/acetonitrilo (MeOH/ACN), se obtuvieron *clusters* tetranucleares *butterfly* que contienen metóxido como ligando puente e incorporan los contraniones nitrato a la esfera de coordinación del Dy(III) (figura 1; izquierda); en acetonitrilo puro, se obtuvieron *clusters* hexanucleares Co₃/Dy₃ (figura 1; centro) en los que los contraniones son externos al *cluster* (aunque puentean *clusters* diferentes en la celda unidad), y que contienen además acetonitrilo en la estructura así como oxhidrilos y aguas en la esfera de coordinación de Dy(III) (figura 1, derecha).

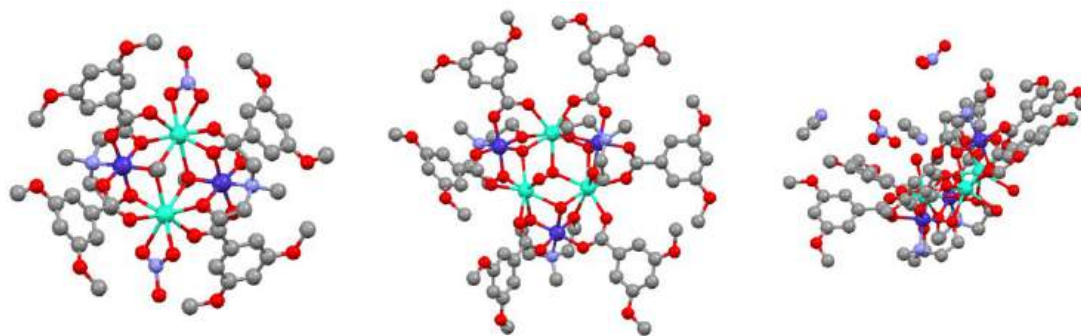


Figura 1. Estructura del *cluster butterfly* Co₂/Dy₂ obtenido en ACN/MeOH (izq) y del *cluster* hexanuclear Co₃/Dy₃ (centro; se muestra sólo una de las moléculas independientes de la celda unidad) obtenido en ACN, que presenta forma de corona (derecha) y presenta varias diferencias en la esfera de coordinación de Dy, así como ACN de solvatación. (los átomos de H fueron omitidos por claridad)

[1] D. Gatteschi, R. Sessoli, J. Villain, Molecular Nanomagnets, Oxford University Press, 2006.

[2] A.V. Funes, P. Alborés, Eur. J. Inorg. Chem., (2018) 2067–2089.

[3] Ch. Bonnenfant, N. Vadra, M. Rouzières, R. Clérac, F.D. Cukiernik, P. Alborés, Dalton Trans., 53 (2024) 2815–2825.



SÍNTESIS, ESTRUCTURA CRISTALINA, ESTUDIOS TEÓRICOS Y CARACTERIZACIÓN DE LA SULFONAMIDA 5-AMINO-N-TOSIL-1,3,4-TIADIAZOL-2-SULFONAMIDA

J. Díaz^{a*}, H. Baldoni^b, G. Gomez^c, M. Fernandez Baldo^d, D. Vega^e

^a Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Av. Ejército de los Andes 950, D5700 BPB, San Luis

^b Instituto Multidisciplinario de Investigaciones Biológicas de San Luis (IMIBIO-CONICET), Universidad Nacional de San Luis (UNSL), CONICET, Ejército de los Andes 950, San Luis D5700BWS, Argentina.

^c Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI), Departamento de Química, Universidad Nacional de San Luis (UNSL), CONICET, Ejército de los Andes 950, San Luis D5700BWS, Argentina.

^d Instituto de Química San Luis (INQUISAL), Departamento de Química. Universidad Nacional de San Luis, CONICET. Ejército de Los Andes 950. D5700BWS. San Luis, Argentina.

^e Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. Gral. Paz 1499, 1650 San Martín, Buenos Aires, Argentina

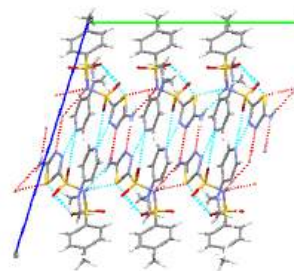
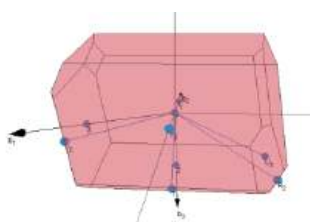
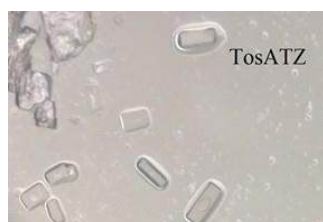
*radiaz@email.unsl.edu.ar

Palabras claves: 1,3,4-TIADIAZOL; DRX-MONOCRISTAL; FTIR; RMN; ATG/DSC; QTAIM; EDA

Las sulfonamidas exhiben una notable diversidad estructural que, junto con su versatilidad como ligandos de iones metálicos, las convierte en plataformas promisorias para el diseño de complejos con potencial farmacológico. En este trabajo se reporta la síntesis de 5-amino-N-tosil-1,3,4-tiadiazol-2-sulfonamida (TosATZ) y su caracterización estructural y fisicoquímica.

La estructura cristalina de TosATZ se resolvió por difracción de rayos X de monocristal. El compuesto cristaliza en el sistema triclinico, grupo espacial P-1 (2) con parámetros de celda: $a = 10,8832(18)$ Å; $b = 16,052(9)$ Å; $c = 18,66(3)$ Å; $\alpha = 106,8(10)^\circ$; $\beta = 91,84(8)^\circ$; $\gamma = 99,83(3)^\circ$, ($Z = 6$). La estabilización del empaquetamiento se asocia a una red de puentes de hidrógeno que involucra anillos 1,3,4-tiadiazol vecinos y contactos N-H...S; las interacciones de dispersión (van der Waals) aportan de modo significativo a la cohesión del sólido.

La caracterización espectroscópica (FTIR; RMN de ^1H y ^{13}C) muestra las bandas y desplazamientos químicos esperados para los modos N-H y SO₂, los estiramientos del anillo 1,3,4-tiadiazol y las señales correspondientes a fragmentos aromáticos y alifáticos. Los estudios térmicos (ATG/DSC) evidencian un proceso endotérmico sin pérdida de masa asociado al punto de fusión (223–225 °C), verificado por microscopía de platina caliente.



Para racionalizar las interacciones intermoleculares se combinaron análisis QTAIM (topología de la densidad electrónica) y EDA (descomposición energética), que corroboran el rol cooperativo de puentes de hidrógeno y dispersión en la estabilización del cristal. Finalmente, ensayos in vitro frente levaduras de relevancia clínica —*Candida albicans* (DMic 972.576), *Candida krusei* (DMic 951.705), *Candida glabrata* (DMic 982.882), entre otras— indican actividad antifúngica de TosATZ.

[1] J.R.A. Díaz, M.A. Fernández Baldo, G.A. Echeverría, H.A. Baldoni, D. Vullo, J. Enzyme Inhib. Med. Chem. 31(11) (2016) 51–62.



ESTUDIO DE LA INCIDENCIA DEL LAVADO Y MEDIO DE CONSERVACIÓN DEL MOF MIL-101(Fe) EN SU ESTABILIDAD ESTRUCTURAL

N.D. Escudero^{1*}, B.P. Barbero¹, M.C. Bernini¹

¹Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI, UNSL-CONICET), Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis (UNSL), Almirante Brown 1455, San Luis, C.P. 5700, Argentina.

*dahianaescudero13@gmail.com

Palabras claves: REDES METAL ORGÁNICAS; ALMACENAMIENTO; ESTABILIDAD.

Las Redes Metal-Orgánicas (MOFs, por sus siglas en inglés) han sido aplicadas con éxito como catalizadores en una amplia variedad de reacciones en fase líquida [1]. En particular, los Fe-MOFs basados en el ligando ácido tereftálico (BDC) resultan especialmente atractivos debido a su bajo costo y sus características ambientalmente amigables, ya que su síntesis puede alinearse con principios de economía circular, utilizando residuos de plástico PET (polietilentereftalato) como fuente del ligando BDC. En este contexto, empleando dicho ligando y Fe^{3+} , y mediante un control exhaustivo de las condiciones de síntesis, es posible obtener diferentes fases cristalinas como MIL-53, MIL-88, MIL-101 y MIL-68 [2]. Uno de los principales desafíos consiste en lograr la obtención pura de la fase deseada, dado que se trata de isómeros supramoleculares.

En el presente trabajo se reportan los estudios de síntesis y almacenamiento del MOF MIL-101(Fe), en el marco de una tesis doctoral que planea emplear éste y otros MOFs como catalizadores Fenton. Para ello, se evaluaron dos metodologías previamente reportadas donde la principal variación entre ellas es la temperatura de síntesis y las etapas de lavado. Al aplicar una de tales metodologías [3] se observó la formación de la estructura cristalina deseada como mayoritaria (Figura 1, trazo rojo). Para reforzar el enfoque sustentable y ecológico de la síntesis, se ensayó una variante que consiste en sustituir el disolvente tóxico DMF por etanol, un solvente menos nocivo, manteniendo constantes las demás condiciones del protocolo exitoso. Sin embargo, el producto obtenido en este caso presentó menor intensidad en las reflexiones de la zona de 2θ por debajo de 10° . (Figura 1, trazo azul). Con el objetivo de mejorar la pureza de la fase y dado que los MOFs son estructuras muy porosas, la etapa de lavado suele permitir la eliminación de impurezas correspondientes a productos secundarios menos estables o restos de reactivos sin reaccionar. Por lo tanto, se estudió la influencia de la naturaleza del disolvente de lavado, empleando solo DMF (3 intercambios) o de DMF (2 intercambios) + acetona (1 intercambio), logrando una mejora en la pureza de la fase MIL-101(Fe) con la incorporación de acetona (Figura 1, trazo magenta). Luego de una semana de exposición al aire, el sólido sintetizado presentó pérdida de cristalinidad, por lo que se estudió la estabilidad del MOF almacenándolo en diferentes solventes como por ejemplo tolueno y agua. Luego de una etapa de secado, las muestras fueron analizadas por DRXP (Figura 1, trazo verde y amarillo, respectivamente). Aún no se han identificado las condiciones que permitan almacenar el MOF sin que ocurra pérdida de cristalinidad o transformación de la fase segregando impurezas. Se prevé continuar el estudio evaluando otras alternativas de solventes de lavado y almacenamiento que aún no han sido exploradas.

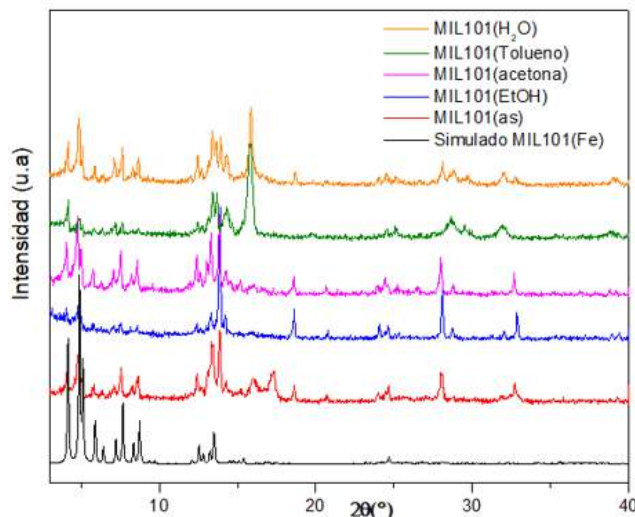


Figura 1. Difractogramas de la muestra MIL101(as) con cambios en el solvente de síntesis, de lavado y de almacenamiento.

[1] C. Gao, S. Chen, X. Quan, H. Yu, Y. Zhang, J. Catal. 356 (2017) 125–132.

[2] D. Bara, E. G. Meekel, I. Pakamóré, C. Wilson, S. Ling, R. S. Forgan, Mater. Horiz. 2021,8, 3377–3386.

[3] S. Edebali, Appl. Surf. Sci. Adv. 2023,18, 100496.

**ENFERMEDADES INFECCIOSAS DESATENDIDAS: ESTUDIO DE UN BIOMATERIAL
ESTRATÉGICO BASADO EN POLOXAMER E IVERMECTINA**B.A. Mezzano^a, M.S. Bueno^a, V.C. Fuertes^{b*}, M.R. Longhi^a, C. Garnero^a^a Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba – Unidad de Investigación y Desarrollo en Tecnología Farmacéutica (UNITEFA-CONICET), Córdoba, Argentina^b Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba – Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC-CONICET), Córdoba, Argentina

*vfuertes@unc.edu.ar

Palabras claves: SÍNTESIS POR FUSIÓN; POLÍMERO; DISPERSIÓN SÓLIDA; DRXP; SOLUBILIDAD

Las enfermedades infecciosas desatendidas son un grupo de enfermedades que afectan desproporcionadamente a las comunidades que viven en zonas vulnerables, representando un obstáculo para el desarrollo social y económico. Sin embargo, son enfermedades abordables desde la salud pública [1]. Ivermectina (IVM), el fármaco de elección para tratar oncocercosis y filariasis linfática, se caracteriza por tener una buena permeabilidad. No obstante, su uso es limitado debido a su baja solubilidad en agua, lo que resulta en una baja biodisponibilidad oral [2].

Por otra parte, los poloxámeros han atraído considerable atención en el ámbito farmacéutico como excipientes con propiedades especiales como biocompatibilidad, biodegradabilidad y buena tolerancia, que los destacan como *biomateriales* por su capacidad para mejorar propiedades biofarmacéuticas de diversos fármacos. En particular, poloxamer 407 (P407) es ampliamente utilizado en la preparación de dispersiones sólidas (DS). Estudios previos han demostrado que las condiciones de síntesis de DS de IVM afectan el arreglo molecular del P407, lo cual se refleja en su capacidad para mejorar la solubilidad del fármaco [3].

Este estudio se centró en evaluar cómo las condiciones de síntesis de DS de IVM con el excipiente P407, obtenidas empleando el método de fusión, influyen en las propiedades del sólido resultante y, en consecuencia, en las propiedades biofarmacéuticas del fármaco. Para ello, se analizaron los efectos de la proporción de polímero, la velocidad de enfriamiento y la temperatura final del proceso empleando DRXP (Figura 1), DLS, estudios de solubilidad de saturación y liberación *in vitro*.

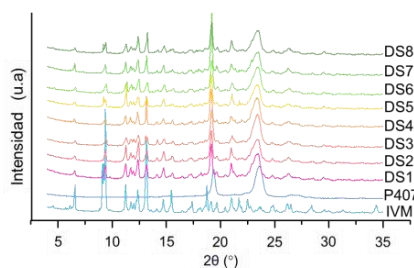


Figura 1. Patrones de difracción de rayos X de polvos de IVM, P407 y las dispersiones sólidas.

La caracterización de las DS evidenció una disminución tanto en el índice de cristalinidad como en el tamaño de las partículas, según lo determinado por DRXP. Para las DS conteniendo IVM y P407 en una proporción 1:1 p/p, obtenidas por enfriamiento rápido, dichas características podrían explicar su capacidad para aumentar la solubilidad en agua aproximadamente unas 1600 veces, además de mejorar significativamente su perfil de liberación en comparación con IVM pura. Se concluye que a través del control de variables críticas en la síntesis de DS a base de P407 es posible modular eficazmente la microestructura resultante y optimizar propiedades biofarmacéuticas de IVM con la finalidad de mejorar su biodisponibilidad oral.

[1] Organización Panamericana de la Salud, OMS. Enfermedades infecciosas desatendidas en las Américas. Washington, D.C., 2016. ISBN 978-92-75-11896-2.

[2] J.A. Camargo, A. Sapin, C. Nouvel, D. Daloz, M. Leonard, F. Bonneaux, J.-L. Six, P. Maincent, Drug Dev. Ind. Pharm., 39 (2013) 146–155.

[3] B.A. Mezzano *et al.*, BIOPOLI 2024, V workshop virtual de polímeros biodegradables y biocompuestos.



EXPLORING SUPPORTED PORPHYRIN MOFs ON MESOPOROUS SILICA TOWARDS CO₂ REDUCTION PHOTOCATALYSIS

G.E. Gomez^{a*}, O. Akinsoji^b, S. Koehne^b, D. Villarroel-Rocha^c, M. Hamer^d, K. Sapag^c, J. Hupp^b

^a Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950, San Luis (5700), Argentina. Instituto de Investigaciones en Tecnología Química, Almirante Brown 1455, 5700, Universidad Nacional de San Luis.

^b Northwestern University, 2145 Sheridan Road, Evanston, IL 60208, USA.

^c Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950, San Luis (5700), Argentina. Instituto de Física Aplicada.

^d Instituto de Ciencias, Universidad Nacional de General Sarmiento-CONICET, CP1613 Los Polvorines, Argentina.

*germangomez1986@gmail.com

Keywords: PORPHYRIN FRAMEWORKS; LANTHANIDES; PHOTOCATALYSIS; COMPOSITES

Metal–porphyrin frameworks (MPFs) incorporating trivalent lanthanide ions are one of the most sought-after materials in the past decade. Their intrinsic porosities, combined with the optical properties imparted by the metal nodes, making them attractive multifunctional optical materials [1]. In this work, we explored a MPF obtained through the solvothermal reaction between tetrakis(4-carboxyphenyl) porphyrin (H₄TCPP) and samarium chloride, yielding a 3D MOF with the formula [Sm₂(DMF)(TCPP)_{1.5}] (**Sm-TCPP**) (see Figure 1a). Additionally, a composite with KIT-6 mesoporous silica, denoted as **Sm-TCPP@KIT**, was designed to enhance chemical stability and long-term photocatalytic performance.

In the present work, we synthesized and characterized both compounds by powder X-ray diffraction, thermogravimetric analysis (TGA), scanning electron microscopy (SEM), and UV–vis and emission spectroscopies. Both compounds crystallize in the C2/c space group, as previously reported [2]. The TGA curves showed that the combination with KIT-6 was advantageous for improving the thermal stability of the **Sm-TCPP@KIT**. The UV–vis spectra showed a maximum absorption peak centered at 425 nm, which is close to the simulated sunlight source. Nitrogen sorption data and BET surface area measurements were collected at 77 K with N₂ using a volumetric technique, giving values of 509 and 476 m²·g⁻¹ for **Sm-TCPP** and **Sm-TCPP@KIT**, respectively. SEM characterization of **Sm-TCPP@KIT** revealed a homogeneous elemental distribution of Sm, C, O, and Si, confirming the formation of the composite (Figure 1b). The catalytic activities were evaluated by dispersing 8 mg of each compound in acetonitrile saturated with CO₂ gas and using TEOA as a sacrificial electron donor. Conversions were determined by gas chromatography, taking headspace samples every hour. Under 400 nm excitation, the photocatalytic reduction of CO₂ produced CH₄ and CO formation, with high selectivity toward methane (87% and 63% for **Sm-TCPP** and **Sm-TCPP@KIT**, respectively). The calculated turnover frequency (TOF) for methane production were 43% and 21.6% for **Sm-TCPP** and **Sm-TCPP@KIT**, whereas **Sm-TCPP** and **Sm-TCPP@KIT** exhibited a TOF of 6.6% and 12.6 h⁻¹ for CO production respectively. In terms of photocatalytic performance, the composite maintained catalytic activity for 24 h under continuous irradiation (Figure 1c), while **Sm-TCPP** decomposed after 8 h of continuous irradiation. These findings highlight the potential of MOF-based composites as multifunctional materials with potential optical properties for emerging energy-related applications.

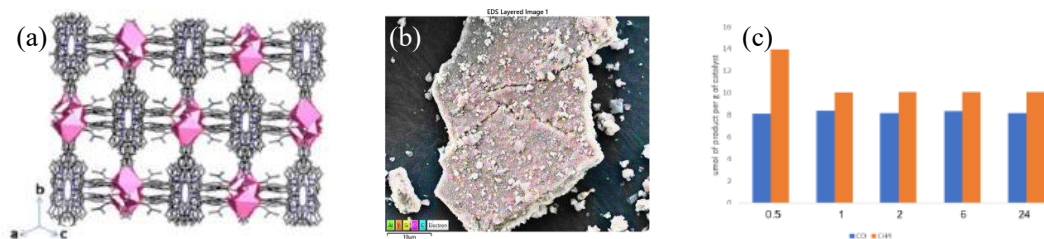


Figure 1. Representation of **Sm-TCPP** (a), SEM image (b) and CO and CH₄ production (c) of **Sm-TCPP@KIT** composite.

[1] C.-W.Kung, C.O. Audu, A.W. Peters, H. Noh, O.K. Farha, J.T. Hupp, ACS Energy Lett., 2 (2017) 2394–2401
T.T. Perez, P.B. Gonzalez, Mater. Lett., 62 (2022) 184–186.

[2] F.C. Herrera, R.M. Caraballo, G.J.A.A. Soler Illia, G.E. Gomez, M. Hamer, ACS Omega, 8 (2023) 46777–46785.

**INGENIERÍA CRISTALINA PARA EL DISEÑO DE MATERIALES FARMACÉUTICOS: DISEÑO RACIONAL DE NUEVAS SALES DE ALBENDAZOL****E.L. Gutiérrez^{a*}, M.G. Russo^a, G.M. Leyes^a, E.V. Brusau^a, A. Ayala^b, M.C. Bernini^a, F. Di Salvo^c**^a Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI, CONICET–UNSL), San Luis, Argentina.^b Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará (UFC), Fortaleza, CE, Brasil. ^c Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE, CONICET–UBA), CABA, Argentina.

*egutierrez@unsl.edu.ar

Palabras claves: ANTIHELMÍNTICOS; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; DISEÑO RACIONAL; POLIMORFISMO

Benzimidazol (B) es una molécula heterocíclica formada por la fusión de un anillo bencénico y otro imidazólico, que actúa como un importante farmacóforo, exhibiendo diversas actividades biológicas. Los derivados de B poseen múltiples aplicaciones terapéuticas, principalmente debido a su actividad farmacológica frente a diversos patógenos [1]. 2-aminobenzimidazol (AB) y sus derivados presentan una estructura de gran interés desde la perspectiva de la química supramolecular, con varios sitios donores y/o aceptores de enlaces de hidrógeno. Esta característica ofrece una base para predecir el ensamblado supramolecular mediante diversos patrones de enlace de hidrógeno, incluidos cadenas, anillos y motivos intramoleculares. Albendazol (ABZ, un derivado de AB) presenta actividad antihelmíntica de amplio espectro y ha sido utilizado en medicina humana durante las últimas décadas. Sin embargo, su escasa solubilidad en agua limita su biodisponibilidad [2], haciendo necesario la obtención de derivados con mejor rendimiento.

En este trabajo presentamos: (i) el diseño racional basado en principios de ingeniería cristalina y en el análisis racional de la base de datos CSD [3], y (ii) la determinación estructural por difracción de rayos X de cristal único de una serie de nuevos materiales, como estrategia para modular las propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas de ABZ. El diseño estuvo guiado por la elevada probabilidad estadística de formación de un sintón supramolecular $R_2^2(8)$ entre las formas protonadas de AB y ABZ, y diversos oxianiones. La capacidad de estos oxianiones para imitar el motivo $R_2^2(8)$ observado en la estructura cristalina de AB y ABZ proporciona una alternativa para el diseño de nuevos materiales multicomponente con propiedades mejoradas, ya que favorece el ensamblaje de los componentes en estructuras estables.

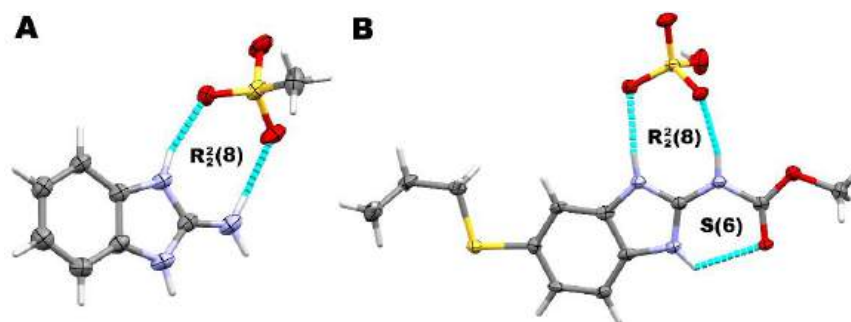


Figura 1. Motivo supramolecular $R_2^2(8)$ observado en las estructuras de dos sales de AB (A) y ABZ (B).

Nuestros resultados indican que la protonación de ABZ impide la tautomerización y, en consecuencia, la interconversión polimórfica. La caracterización en curso de estos materiales mediante técnicas de estado sólido y cálculos teóricos, sugiere que presentan buena estabilidad térmica y solubilidad, lo que los convierte en candidatos para formulaciones farmacéuticas.

[1] B. Pathare, T. Bansode, Results Chem., 3 (2021) 100200

[2] M. B. Pranzo, D. Cruickshank, M. Coruzzi, M. R. Caira, R. Bettini, J. Pharm. Sci., 99(9) (2010) 3731–3742

[3] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, Acta Cryst. B72, (2016), 171–179

The author(s) are grateful to the FAIRE programme provided by the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) for the opportunity to use the Cambridge Structural Database (CSD) and associated software.



CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE NUEVAS FORMAS SÓLIDAS DE ILOPERIDONA

L.E. Harrison^{a,b*}, E. Freire Espeleta^{b,c}, P. Gaztañaga^b, D R. Vega^b

^a Instituto de Tecnología Nuclear Dan Beninson, Universidad Nacional de San Martín, CNEA.

^b Departamento de Física de la materia condensada, G1yA, GAIDI, CAC, CNEA

^c CONICET

*leharrison.28@gmail.com

Palabras claves: SC-XRD; CRISTALES MULTICOMPONENTES; PXRD, FTIR

La Iloperidona es un antipsicótico de segunda generación, utilizado para el tratamiento de la esquizofrenia y los episodios maníacos o mixtos asociados al trastorno bipolar [1]. La Iloperidona en su forma sólida, ha sido estudiada en este trabajo mediante técnicas de difracción de Rayos X de monocristal (SC-XRD), debido a que su forma cristalina posee una limitada solubilidad [2], es por ello que busca desarrollar nuevas formas sólidas de Iloperidona, con el objetivo de mejorar sus propiedades biofarmacéuticas.

Se evaluaron mezclas de Iloperidona utilizando ácidos carboxílicos como coformadores, mediante la mezcla en solución, y se promovió la cristalización por evaporación lenta. Se obtuvieron cristales adecuados para SC-XRD, y se determinó que la forma pura de Iloperidona cristaliza en el sistema monoclinico, grupo espacial $P2_1/n$. En cambio, la evaporación de soluciones con ácido fórmico dio lugar a cristales con simetría triclinica, lo que sugiere la formación de un cocrystal iónico o sal.

Ambas formas fueron caracterizadas además mediante espectroscopía infrarroja (FTIR), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y termogravimetría (TG). Se observaron diferencias en el comportamiento térmico y desplazamientos en bandas clave del FTIR, que respaldan la existencia de interacciones específicas entre la Iloperidona y el ácido fórmico.

En la búsqueda de un diseño racional de nuevas formas farmacéuticas con mejores propiedades biofarmacéuticas, habiendo observado la formación de nuevas formas cristalinas con ácidos carboxílicos, se desarrollaron nuevas formas cristalinas de Iloperidona con ácidos carboxílicos como coformadores.

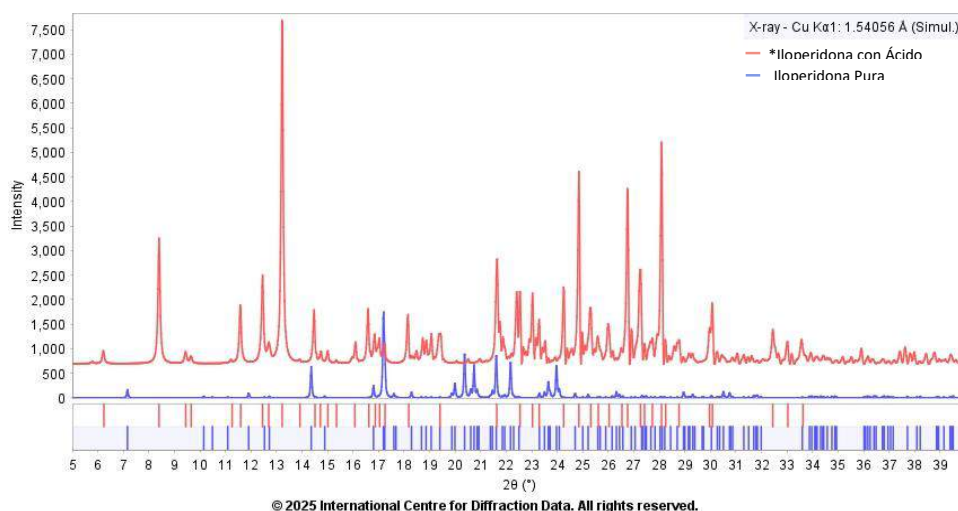


Figura 1. Comparación de Difractograma de Iloperidona Pura [3] y nueva fase cristalina de Iloperidona con ácido fórmico.

[1] S. Leucht, A. Cipriani, L. Spinellic, D. Mavridis, D. Örey, F. Richter, M. Samara, C. Barbui, R.R. Engel, J.R. Geddes, W. Kissling, M.P. Stapfa, B. Lässig, G. Salanti, J.M. Davis, *The Lancet*, 382 (2013) 951–962.

[2] T. Zhang, Y. Yang, H. Wang, F. Sun, X. Zhao, J. Jia, J. Liu, W. Guo, X. Cui, J. Gu, G. Zhu, *Cryst. Growth Des.* 13 (2013) 5261–5266.

[3] Y. Peng, Tianjin Association for Instrumental Analyses, P.R. China. ICDD Grant-in-Aid 2010. Powder Diffr. 00, 062–1303.



ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE AUTOENSAMBLADO DE SISTEMAS BASADOS EN DERIVADOS DE L/D-FENILALANINA: OBTENCIÓN DE MATERIALES CRISTALINOS Y GELES SUPRAMOLECULARES

C. Iturriaga^{a*}, M.R. Lopez Borda^{a,b}, J. Sandobal^a, J.M. Rey^{a,b}, F. Movilla^{a,b}, F. Di Salvo^{a,b}

^aDQIAyQF, FCEyN, UBA, Buenos Aires, Argentina. ^bCONICET-INQUIMAE, FCEyN, UBA, Buenos Aires, Argentina.
*celinaiturriaga.uba@gmail.com

Palabras claves: AMINOÁCIDOS; QUÍMICA SUPRAMOLECULAR; AUTOENSAMBLADO

En los últimos años, la química supramolecular y el autoensamblaje de ciertas proteínas y péptidos han despertado interés debido a su papel en la formación de agregados similares a las fibrillas amiloides [1], los cuales están asociados a trastornos degenerativos [2]. También se han observado estructuras fibrilares con actividad citotóxica en pequeñas moléculas como L-fenilalanina (L-Phe) [3]. Sobre esta base, nuestra investigación busca contribuir a la comprensión de la química supramolecular de moléculas biológicamente relevantes, como los aminoácidos y sus derivados. Los aminoácidos son una de las fuentes más accesibles de compuestos quirales enantioméricamente puros. Una modificación frecuente de estas especies consiste en la formación de una base de Schiff y posterior reducción, lo que permite conservar los grupos funcionales amino y ácido. Como resultado se obtiene un sistema sensible al pH y con la habilidad de establecer interacciones intermoleculares estables pero estas modificaciones influyen en la química supramolecular y las propiedades de autoensamblado.

En este trabajo presentamos el estudio de nuevos derivados de fenilalanina, **L-PheTol**, **D-PheTol**, **rac-PheTol**, obtenidos a partir de tolualdehído, y **L-PheAni**, **D-PheAni**, **rac-PheAni**, empleando anisaldehído, mediante la reducción de las correspondientes bases de Schiff (Fig. 1^a). A partir de la evaporación lenta del solvente de una solución ácida de estos compuestos, se obtuvo material cristalino apto para ser estudiados por difracción de rayos X de monocristal. Estos dieron como resultado la confirmación de la obtención de **PheTol** como sal de cloruro para ambos enantiómeros y la mezcla racémica, pero para **PheAni**, fue posible únicamente caracterizar la sal de cloruro de la mezcla racémica. Adicionalmente, los monocristales obtenidos a partir de la evaporación de una solución acuosa básica de **L-PheTol** corresponden a la estructura del zwitterión. El análisis supramolecular de todas las estructuras estudiadas demuestra que se encuentran estabilizadas principalmente por interacciones electrostáticas asistidas por enlaces de hidrógeno (Fig. 1c). Al igual que su precursor, L-Phe [4], estos nuevos derivados pueden actuar como gelificantes en determinados disolventes y, para alguno de ellos es posible obtener distintos xerogeles, constituidos por redes fibrilares (Fig. 1b) o estructuras mesocristalinas.

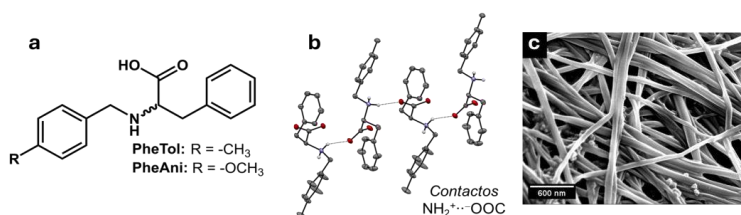


Figura 1. a) Esquema de las moléculas estudiadas; b) Arreglo supramolecular 1D observado en **L-PheTol** como zwitterión, elegida como ejemplo del comportamiento supramolecular típico de estos sistemas; c) Xerogel de **L-PheTol** en butanol.

[1] S. Shaham-Niv, L. Adler-Abramovich, L. Schnaider, E. Gazit, *Sci. Adv.*, 1 (2015) e1500137.

[2] C. Haass, D.J. Selkoe, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, 8 (2007) 101–112.

[3] L. Adler-Abramovich, L. Vaks, A. Caflisch, D. Frenkel, E. Gazit, *Nat. Chem. Biol.* 8 (2012) 701–706.

[4] T. Das, M. Häring, D. Haldar, D.D. Díaz, *Biomater. Sci.*, 6 (2018) 38–59.

Agradecemos al programa FAIRE, proporcionado por CCDC y al Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS), Campinas, Brasil; este trabajo fue financiado por UBA, ANPCyT y CONICET.



EFFECTO DE LAS CONDICIONES DE HUMEDAD RELATIVA EN LA ESTRUCTURA CRISTALINA DE COMPLEJOS CIRCONIO-ACETATO

A. Kurtz^{a*}, F. Di Salvo^b, M. V. Lombardo^{a,c}, A. V. Bordoní^{a,c}

^a INN (CONICET-CNEA), Buenos Aires, Argentina.

^b DQAF/INQUIMAE (CONICET-FCEN), Buenos Aires, Argentina.

^c Gerencia Química – Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, Argentina.

*alexanderkurtz34@gmail.com

Palabras claves: COMPLEJOS CIRCONIO-ACETATO; EVOLUCIÓN ESTRUCTURAL; MOF

Los compuestos de coordinación de circonio y carboxilatos presentan un renovado interés como precursores en la síntesis de redes metal-orgánicas (o MOFs por *metal-organic frameworks*) para formar las unidades secundarias de construcción (o SBUs por *secondary building units*) [1]. El ion acetato se destaca como ligando para este tipo de sistemas por su disponibilidad, bajo costo y seguridad medioambiental relativa. Debido a los diferentes modos posibles de coordinación de los carboxilatos y la naturaleza del metal empleado, se espera la formación de una amplia diversidad de especies, con características estructurales, reactividad y aplicabilidad como SBUs diferentes [2,3].

En este trabajo se estudia la influencia de las condiciones de humedad relativa (H_r) en la evolución de la estructura de especies circonio-acetato en función del tiempo. Se analizan dos condiciones de humedad relativa fija, alta y baja, y se comparan con la transformación estructural observada en condiciones de humedad relativa no controlada. Para generar las condiciones de humedad constante se utilizaron cubas de equilibrio higroscópico con soluciones saturadas de KNO_3 ($H_r = 93\%$) e KOH ($H_r = 9\%$). La evolución de la estructura de los compuestos se siguió a través de difracción de rayos X de polvos (PXRD), análisis termogravimétrico acoplado a espectrometría de masas (TGA-MS) y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR). Luego, se estudió la aplicación de las especies resultantes para la síntesis del MOF UiO-66-NH₂.

Se observó que las condiciones de baja de humedad relativa permiten la formación de la especie que resulta adecuada para la obtención de UiO-66-NH₂. Estos resultados son de gran importancia práctica para el uso de estos compuestos en la síntesis de MOFs basados en Zr ya que brindan información sobre las adecuadas condiciones de almacenamiento y utilización de los precursores.

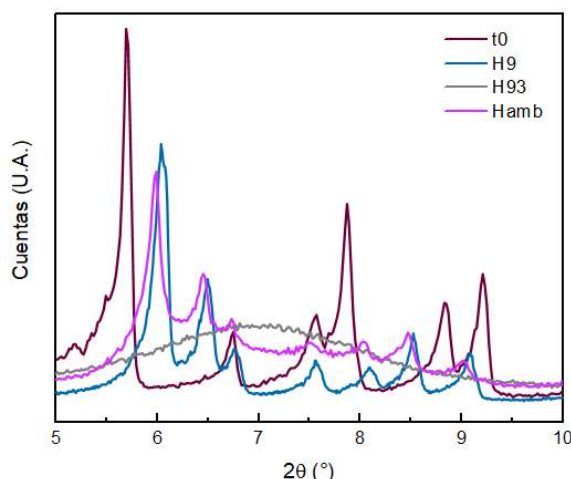


Figura 1. Difractogramas de las muestras a tiempo cero (t_0), y a los 60 días en las diferentes condiciones de H_r : 9% (H9), 93% (H93) y humedad ambiente (Hamb)

[1] Y. Zhang, F. De Azambuja, T. N. Parac-Vogt, *Coord. Chem. Rev.* 438 (2021) 213886.

[2] M. Puchberger, F. R. Kogler, M. Jupa, S. Gross, H. Fric, G. Kickelbick, U. Schubert, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2006) 3283–3293.

[3] C. Hennig, S. Weiss, W. Kretzschmar, A.C. Scheinost, *Inorg. Chem.* 56 (2017) 2473–2480.



ESTUDIO ESTRUCTURAL DE NUEVAS REDES METAL-ORGÁNICAS BASADAS EN IONES Er^{3+} Y Nd^{3+} CON 1,4-NAFTALENDICARBOXILATO

R. del J. Martínez-Villarroel^{a*}, P.H.O. Santiago^b, J.A. Ellena^b, G.E. Gomez^a, M.C. Bernini^a

^a Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (CONICET–UNSL), Almirante Brown 1455 – Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina.

^b Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Av. Trabalhador São-carlense 400, 13566-590 São Carlos, Brasil.

*rosmaira0794@gmail.com

Palabras claves: REDES METAL-ORGÁNICAS; TIERRAS RARAS; DIFRACCIÓN DE RAYOS X.

Las redes metal-orgánicas (MOFs) constituyen una clase de polímeros de coordinación con porosidad permanente, formados por centros metálicos enlazados mediante ligandos orgánicos multitópicos. Estas estructuras se caracterizan por la versatilidad de su síntesis, ya que la selección racional de los centros metálicos y de los ligandos permite modular tanto la topología cristalina como las propiedades físicas y químicas, generando materiales con aplicaciones específicas [1]. En particular, la selección de ciertos iones de tierras raras en combinación con ligandos aromáticos puede conducir a la formación de MOFs con propiedades luminiscentes interesantes [2,3].

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización estructural de dos nuevas MOFs basadas en iones de tierras raras (REE^{3+} : Er^{3+} , Nd^{3+}) y el ligando 1,4-naftalendicarboxilato (1,4-NDC). La reacción solvotérmica en una mezcla de *N,N*-dimetilformamida (DMF) y H_2O (3:2), a 120 °C durante 72 h, condujo a la formación de monocristales de una MOF con Er^{3+} . El análisis por difracción de rayos X de monocristal (SCXRD) reveló que cristaliza en el sistema monoclinico y grupo espacial $\text{P2}_1/\text{c}$, con parámetros de celda $a = 11.0082(4)$ Å, $b = 20.2488(7)$ Å, $c = 16.2598(12)$ Å, $\beta = 109.768(7)^\circ$, $V = 3410.77$ Å³ ($Z = 4$). Asimismo, la síntesis en DMF a 150 °C durante 48 h permitió aislar monocristales del compuesto de Nd^{3+} , también resuelto por SCXRD.

Estas nuevas MOFs presentan la fórmula general $[\text{REE}_2(1,4\text{-NDC})_3(\text{DMF})]$ y resultan isoestructurales con una previamente reportada basada en Eu^{3+} [4]. La unidad asimétrica (Fig. 1a) se compone de dos iones REE^{3+} cristalográficamente independientes, una molécula de DMF coordinada a uno de los dos iones metálicos y tres ligandos 1,4-NDC, los cuales exhiben modos de coordinación quelato-puente y puente bidentado (Fig. 1b). La estructura puede describirse como un arreglo 3D donde los ligandos 1,4-NDC conectan las cadenas de poliedros de coordinación (SBUs 1D) en las direcciones a y c (Fig. 1c). Mediante el programa Topos 5.5.2 [5] se realizó una simplificación de la red contemplando el empaquetamiento de las SBUs, formadas por nodos 5-conectados que determinan una topología tipo **bnn**, con símbolo puntual $(4^6 \cdot 6^4)$ (Fig. 1d).

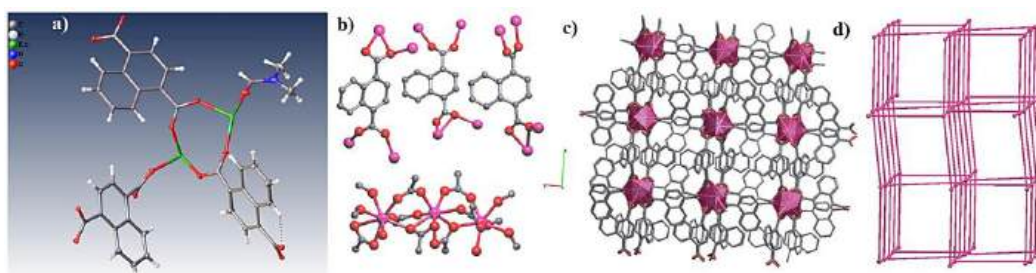


Figura 1. a) Unidad asimétrica y proyección de la estructura cristalina de Er-1,4-NDC; b) modos de coordinación de los ligandos 1,4-NDC (arriba) y detalle de la conectividad de poliedros inorgánicos formando cadenas (abajo); c) proyección de la estructura en la dirección c , y d) topología de red tipo **bnn**.

[1] D. Li, A. Yadav, H. Zhou, K. Roy, P. Thanasekaran, C. Lee, Global chall., 8 (2024) 2300244.

[2] M. D. Allendorf, C.A. Bauer, R.K. Bhakta, R.J.T. Houk, Chem. Soc. Rev., 38 (2009) 1330–1352.

[3] G.E. Gomez, R. Marin, A.N. Carneiro-Neto, A.M.P. Botas, J. Ovens, A.A. Kitos, M.C. Bernini, L.D. Carlos, G.J.A.A. Soler-Illia, M. Murugesu, Chem. Mater., 32 (2020), 7458–7468.

[4] B. Tan, T.H. Zhuang, E. Velasco, K. Xing, Z.F. Wu, X.Y. Huang X.Y., Cryst. Growth Des., 21 (2021) 6543–6551.

[5] V. A. Blatov, A. P. Shevchenko, D. M. Proserpio, Cryst. Growth Des. 2014, 14, 3576.



CARACTERIZACIÓN DE LA FORMA CRISTALINA DE 2,3-DIHIIDROXIPROPIL-4-FENILBUTANOATO

M.F. Rustán^{*a}, S.G. Foray^a, M. Gerber^a

^a CEPROCOR, Gobierno de la Provincia de Córdoba. Sede Santa María de Punilla (CP 5164), Córdoba, Argentina.

^{*}mrustan@ceprocor.uncor.edu

Palabras claves: DIFRACCIÓN; ESPECTROSCOPIA; SÍNTESIS; FÁRMACO

La síntesis de Ingredientes Farmacéuticos Activos (IFAs) es un proceso complejo que puede generar impurezas y subproductos los cuales deben ser controlados porque, incluso pequeñas cantidades, pueden tener efectos significativos en la estabilidad, la seguridad y la eficacia de los medicamentos. Esto requiere contar con sustancias de referencia (SR) del principio activo y de las impurezas completamente caracterizadas para el control de calidad en la producción de medicamentos. El principio activo Trifenilbutirato de glicerilo (GPB) es un medicamento huérfano que sirve para tratar pacientes con trastornos genéticos del ciclo de la urea. Una de las principales impurezas es el 2,3-dihidroxiopropil 4-fenilbutanoato (MGPB) que debe ser controlada ya que su presencia disminuye la concentración efectiva del agente terapéutico activo en el producto GPB.

El objetivo del presente trabajo fue la caracterización del estado sólido de la forma cristalina de MGPB, elaborada como SR para el control de calidad en la producción GPB [1], y adicionalmente se presenta un procedimiento de cristalización para la obtención de dicha forma.

El lote sintetizado de MGPB (con su protocolo de producción y certificado de análisis) se obtuvo mediante la esterificación de glicerol con ácido 4-fenilbutírico (FBA) catalizada por 1-etil-3-(3-dimetilamino propil)carbodiimida clorhidrato (EDC) en medio básico por 4-dimetilaminopiridina (DMAP) y utilizando como solvente acetona/agua (5:1). Se elaboró un lote de producción de 36 envases con 300 mg c/u y una pureza final determinada por balance de masa. El proceso de purificación se realizó por recristalización en un sistema de solventes ternario de 2-propanol/agua ultrapura/hexano en frío y filtración de los cristales al vacío. El producto elaborado se almacena a -4°C.

La identidad química del MGPB fue corroborada mediante Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y Espectrometría de Masas (EM). El análisis por Difracción de Rayos X de polvo (pDRX) de MGPB muestra la existencia de una fase cristalina con reflexiones características a 3.4, 6.9, 13.9, 17.4, 24.7 y 28.1° 2Theta. Por calorimetría diferencial de barrido (DSC), se observa un pico agudo endotérmico de fusión con una temperatura extrapolada de inicio de pico (Onset) de 42,71°C y una temperatura de pico de 45,57°C. Mediante espectroscopía infrarroja (FTIR) se observan indicios en las regiones espectrales correspondientes a los OH y los enlaces CH alifáticos que podrían estar involucrados en las interacciones intermoleculares. Los estudios de estabilidad, todavía vigentes, muestran que la fase cristalina se mantiene estable y sin cambios, conservada a -4°C por más de 6 meses.

En este trabajo se pudo realizar la caracterización del estado sólido por pDRX, DSC y espectroscopías de la forma cristalina de MGPB, que hasta el momento no había sido reportada en bibliografía. Además, se remarca la importancia de caracterizar el estado sólido de SR de impurezas de IFAs para comprender sus propiedades que pueden impactar en el desempeño del control de calidad de los medicamentos.

[1] L. Suchetti, S.G. Foray, T.C. Tempesti, C. Ferrayoli, ChemistrySelect, 9(4) (2024) e202304021.



COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DE Zn(II) CON LIGANDOS DERIVADOS DE L-FENILALANINA: DIVERSIDAD ESTRUCTURAL Y ESTUDIO DE PROPIEDADES

M.R. Lopez Borda^{a,b}, J. Sandobal^{a*}, C. Iturriaga^a, J.M. Rey^{a,b}, F. Movilla^{a,b}, F. Di Salvo^{a,b}

^aDQIAyQF, FCEyN, UBA, Buenos Aires, Argentina. ^bCONICET-INQUIMAE, FCEyN, UBA, Buenos Aires, Argentina.

*jsandobal@qi.fcen.uba.ar

Palabras claves: AMINOÁCIDOS; COMPLEJOS DE ZINC; QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Los aminoácidos son una de las fuentes más fácilmente disponibles de compuestos quirales enantioméricamente puros. Una modificación frecuente de los aminoácidos consiste en la formación de una base de Schiff reducida que conserva los grupos funcionales amino y ácido. Debido a la presencia de grupos funcionales donadores de N y O, estas moléculas, tanto los aminoácidos como sus derivados, son excelentes ligandos para la síntesis de complejos quirales de metales de transición, que influyen su química supramolecular y sus propiedades de autoensamblado [1,2].

En este trabajo, se presentan dos complejos de coordinación con un centro metálico de Zn(II), a partir del derivado de L-Fenilalanina con tolualdehído, *PheTol*, y con anisalaldehído, *PheAni* (Fig 1.a), como ligandos obtenidos por reducción de la base de Schiff correspondiente. Se lograron cristalizar ambos derivados como sal de cloruro, sin embargo, solamente de *PheTol* pudo obtenerse el enantiómero L-, mientras que *PheAni* cristalizó como sal de la mezcla racémica. Los productos fueron obtenidos por evaporación lenta de la solución conteniendo a los reactivos, ligando y de acetato de Zn(II), previamente mortereados y mezclados íntimamente, hasta la obtención de cristales bien definidos.

Mediante la técnica de Difracción de Rayos X de monocristal (mDRX), pudo determinarse que *Zn-L-PheTol* es un complejo mononuclear pentacoordinado con una molécula de agua y dos de *PheTol* como ligandos (Fig 1.b), mientras que *Zn-PheAni* es un polímero de coordinación 1D, de estructura helicoidal, donde los cationes Zn(II) vecinos se conectan mediante dos aniones acetato. La formación de estos polímeros de coordinación fue reportada previamente para derivados de L-Fenilalanina con piperonal, en presencia de Co(II) y Cd(II), con aplicaciones catalíticas en condiciones libres de solvente [3].

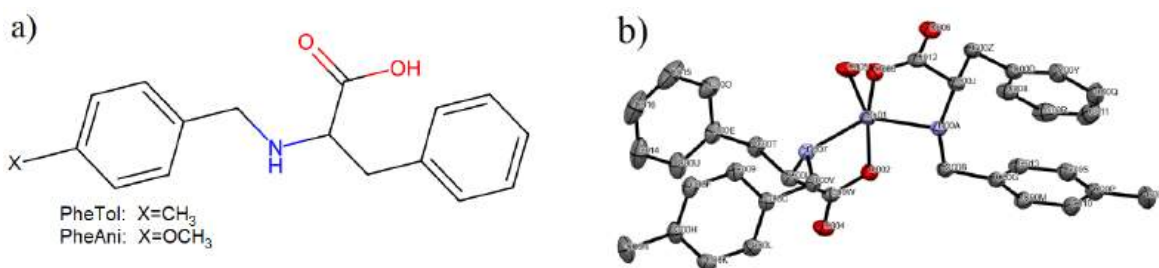


Figura 1.a) Estructura de los ligandos *PheTol* y *PheAni*, b) Estructura molecular del complejo *Zn-L-PheTol*, obtenida por difracción de rayos X.

[1] R. Ganguly, B. Sreenivasulu, J.J. Vittal, *Coord. Chem.* 252 (2008), 1027–1050.

[2] W. Gong, Z. Chen, J. Dong, Y. Liu, Y. Cui, *Chem. Rev.* 122 (2022), 9078–9144

[3] F. Movilla, J. M. Rey, M. Saleta, M. González-Carvajal, E. Spodine, P. Cancino, F. Di Salvo, *Inorg. Chem.* 62 (42) (2023), 17136–17149

Agradecemos al programa FAIRE proporcionado por el Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) por la oportunidad de utilizar la Cambridge Structural Database (CSD) y el software asociado. Este trabajo fue apoyado por la UBA, ANPCYT y CONICET. Además, queremos agradecer al Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS), Campinas, Brasil.



UN COMPLEJO DE Ni(II) COMO CO-CATALIZADOR DE m-TiO₂ PARA LA PRODUCCIÓN FOTOCATALÍTICA DE HIDRÓGENO: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL

A. Santarelli^{a,b*}, A.B.F.A. Barbosa^c, E.S. Lang^c, B. Tirloni^c, E.L. Larghi^{a,b}, G.N. Ledesma^a

^a Instituto de Química Rosario (IQUIR, CONICET-UNR), Fac. de Cs. Bioquímicas y Farmacéuticas, UNR, Suipacha 531, Rosario (Argentina); ^b Fac. de Cs. Bioquímicas y Farmacéuticas, UNR, Suipacha 531, Rosario (Argentina); ^c Laboratório de Materiais Inorgânicos, Universidade Federal de Santa Maria (LMI-UFSM), Santa Maria, Brasil.

*santarelli@iquir-conicet.gov.ar

Palabras claves: COMPLEJO DE Ni(II); CARACTERIZACIÓN; DRX; HIDRÓGENO

Uno de los principales desafíos energéticos es la dependencia del petróleo, cuya combustión genera graves impactos ambientales. Esto impulsa el desarrollo de fuentes de energía limpias y sustentables como el hidrógeno (H₂), cuya combustión solo genera agua. Si bien su producción por electrólisis requiere catalizadores costosos como el Pt, una alternativa es la producción de H₂ a partir de agua utilizando luz solar [1]. En este marco, se destacan las investigaciones centradas en el uso de compuestos de coordinación (basados en metales abundantes) como co-catalizadores en matrices semiconductoras para la producción fotocatalítica de H₂ [2-3].

En este trabajo presentamos la síntesis, caracterización y aplicación de un nuevo compuesto de coordinación de Ni(II), que contiene el tiolato derivado de 3-metil-tiofenol y difenilfosfinoetano (dppe) como ligando bidentado. El producto obtenido [(dppe)Ni(S-C₆H₄-m-CH₃)₂] (**1**) fue identificado y caracterizado por RMN de ¹H, ¹³C y ³¹P, espectroscopía vibracional FTIR y Raman y espectroscopía de absorción UV-vis. La caracterización estructural se completó por difracción de rayos X en monocristal. A su vez, presentamos la síntesis del fotocatalizador **1**@m-TiO₂ basado en dióxido de titanio mesoporoso (m-TiO₂), con énfasis en su aplicación para la producción de H₂ *via* fotólisis del agua (Fig. 1).

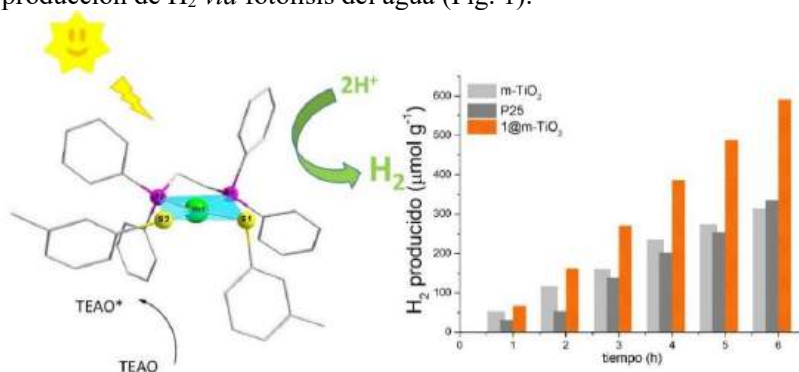


Figura 1. Estructura molecular de **1** y producción de H₂ del co-catalizador **1**@m-TiO₂ irradiado por 6 h.

La reacción de sustitución de cloruros llevó a la formación del complejo neutro **1**, que cristaliza en el sistema monoclinico, grupo espacial *C* 1 2/*c* 1 (15) con *a*= 39,1765(8) Å, *b*= 8,1946(2) Å, *c*= 24,2358(6) Å, β= 114,1280(10)°, *V*= 7100,81 Å³ y 8 moléculas por celda unidad. Dos ligandos tiolato están coordinados de manera monodentada al ion Ni a través del átomo de S y la esfera de coordinación se completa con dppe. El parámetro geométrico τ₄ asume un valor de 0,16 e indica una geometría cuadrada plana levemente distorsionada. Se observan interacciones intermoleculares de tipo C–H···S que dan lugar a la formación de cadenas a lo largo del eje cristalográfico *b*. **1** mejoró la actividad fotocatalítica de m-TiO₂ y mostró una producción de H₂ de casi 600 μmol/g luego de 6 h de irradiación solar. Este hallazgo resalta el potencial de complejos metálicos para el desarrollo de nuevos materiales fotocatalíticos basados en metales abundantes.

[1] W. Haisu, M. Tifang, D. Qinghua, Q. Li, S. Haixia, X. Yun, F. Xianliang. *J. Phys. Chem. C.*, 126 (2022) 1857–1871.

[2] R. Cervo, C.A. Brandl, T. Bortolotto, C.N. Cechin, N. de Freitas Daudt, B.A. Iglesias, E.S. Lang, B. Tirloni, R. Cargnelutti. *Inorg. Chem.* 64 (2025), 7902–7919.

[3] A. Santarelli, C.A. Brandl, C.N. Cechin, T. Bortolotto, N. de Freitas Daudt, R.A. Burrow, E.S. Lang, B. Tirloni, G.N. Ledesma. *Molecular Catalysis*, 566 (2024) 114431.

**MODULACIÓN DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES EN CRISTALES DEL MOF-808**

G.A. Ortega Moreno^a, L. Díaz Amado^b, J.T. García-Sánchez^b, L.A. Lozano^a, V.G. Baldovino-Medrano^b, J.M. Zamaro^{a*}

^a Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE, UNL-CONICET), Universidad Nacional del Litoral (UNL), Facultad de Ingeniería Química, Santiago del Estero 2829, CP. 3000, Santa Fé, Argentina.

^b Laboratorio de Ciencia de Superficies (SurfLab), Centro de Investigaciones en Catálisis (CICAT), Parque Tecnológico de Guatiguará, Km 2 vía El Refugio, Universidad Industrial de Santander, Piedecuesta (Santander), 681011, Colombia.

*zamaro@fiq.unl.edu.ar

Palabras claves: METAL-ORGANIC FRAMEWORK; DEFECTOS; ESTRUCTURA; MODIFICACIÓN

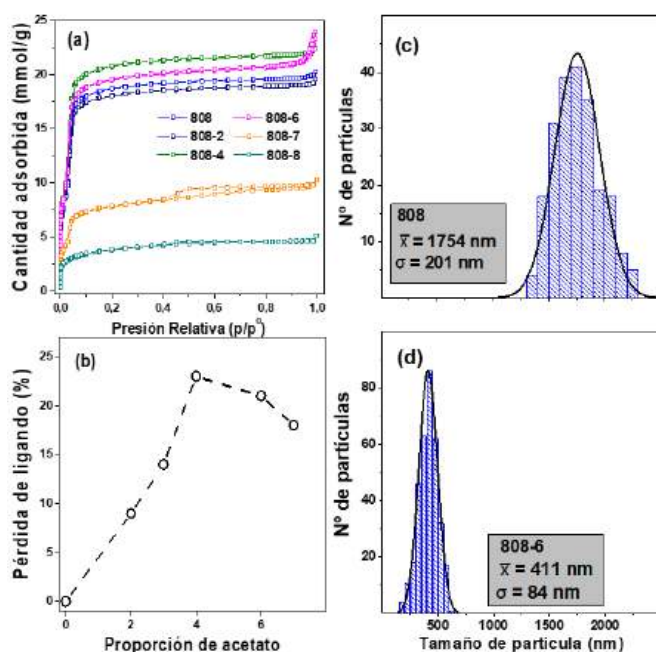


Figura: a) isothermas de N₂; b) Cantidad de ligandos faltantes (TGA); Distribución de tamaño de partículas: c) MOF-808, d) MOF-808-6.

SEM e isothermas de N₂ de los sólidos sintetizados con una adición controlada de este aditivo, demostraron que se modifican las propiedades estructurales del MOF-808. Al incrementar la proporción de acetato en la mezcla de síntesis, se produjo un aumento en la cantidad de defectos del tipo “falta de ligandos”, que pasó por un máximo (Figura). Paralelamente, se originó un máximo en la superficie específica de los materiales y también una disminución progresiva, casi lineal, del tamaño y distribución de tamaño de los cristales (Figura). Los resultados demuestran que la adición de cantidades controladas de acetato, permiten modular las propiedades estructurales del MOF-808, abriendo una interesante alternativa para alterar el comportamiento de dicho material en diversas aplicaciones, como ser catalíticas o adsorbtivas, entre otras.

Las redes metal-orgánicas (MOFs) ideales o teóricas, cuentan con centros metálicos y ligandos coordinados, formando una red que tiene una estructura cristalina perfecta. Sin embargo, en la realidad esto no ocurre y existen imperfecciones que se conocen como defectos estructurales [1]. Tales desajustes de coordinación pueden modificar significativamente las propiedades de estos materiales [2]. Esto llevó a que en los últimos años se desarrolle la rama denominada ingeniería de defectos, que pretende introducir defectos en MOFs de forma racional, preservando su integridad global. Un tipo de defecto local, en particular, es el de falta de ligandos o “missing linkers”.

A pesar del progreso en las estrategias de ingeniería de defectos, su introducción controlada y la comprensión de los efectos en las propiedades de los MOFs es un tema en actual expansión. En el presente trabajo se investigó el efecto de la adición de sales de acetato durante la síntesis solvotérmica del MOF-808 en las propiedades de dicho material. Los estudios mediante XRD, TGA,

- [1] J. Ren, M. Ledwaba, N. Musyoka, H. Langmi, M. Mathe, S. Liao, W. Pang; Coord. Chem. Rev. 349 (2017) 169–197.
[2] X. Hou, J. Wang, B. Mousavi, N. Klomkliang, S. Chaemchuen; Dalt. Trans. 51 (2022) 8133–8159.



ANALYSIS OF THE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP AND KINETIC PARAMETER DETERMINATION OF THE MALOLACTIC ENZYME OF *STREPTOCOCCUS MUTANS*

V. Abratti Bogdanich^{1*}, D.D. Saavedra¹, M.N. Lisa², C.E. Alvarez¹

¹ Centro de Estudios Fotosintéticos y Bioquímicos (CEFOBI- CONICET), FBIOyF, UNR, 2000 Rosario.

² Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR), Ocampo y Esmeralda, Rosario S2002LRK, Argentina

*valentina.abratti@gmail.com

Keywords: FERMENTATION; MALOLACTIC; STRUCTURE

Malolactic fermentation (MLF) is a secondary fermentation process that occurs in the presence of L-malate and acidity, allowing lactic acid bacteria (LAB) to prevent cytosolic acidification and generate a proton gradient across the membrane that drives ATP synthesis. This process is catalyzed by a malolactic enzyme (MLE), which converts L-malate into L-lactate in a reaction that depends on NAD^+ and Mn^{2+} . MLE plays a pivotal role not only in microbial energy metabolism but also in the industrial production of fermented foods such as wines, ciders, cheeses, and yogurts, where MLF contributes to both nutritional quality and organoleptic characteristics. In addition, MLF has implications for human health; in *Streptococcus mutans*, a key agent of dental caries, it is considered a virulence factor. Despite its relevance, MLF remains a spontaneous and poorly regulated process, mainly due to insufficient knowledge about the biochemical features of MLE. Identifying the molecular determinants and environmental conditions that modulate its activity could pave the way for controlled fermentation strategies.

In this study, we present the kinetic parameters determined for *Streptococcus mutans* MLE, obtained in optimal conditions (pH 6, 50°C) previously determined by our group. The V_{max} and K_m for NAD^+ and malate were determined by a discontinuous method reported in our previous work. These parameters were validated using HPLC chromatography. We have obtained new crystals of the enzyme in presence of lactate, and a combination of malate and lactate, both with added NAD^+ and Mn^{2+} . We also analyzed the enzyme's stability in different storing conditions over varying periods of time, and the effect of Mn^{2+} concentration on its structure and activity, evaluating oligomeric state by electrophoresis in a native gel and secondary structure by circular dichroism.

These results are the next step in our goal to characterize the enzyme's regulatory metabolites and identify structural determinants of the enzyme activity, both of which would enable us to perform studies on potential inhibitors to treat dental caries. In the future, these results could also be used to further understand malolactic fermentation in wine, given the high structural homology of *S. mutans* MLE with *Oenococcus oeni* MLE, one of the main bacteria responsible for MLF after alcoholic fermentation takes place.

[1] C. Schumann, H. Michlmayr, A.M del Hierro, K.D.Kulbe, V. Jiranek, R. Eder, T.H.Nguyen. Bioengineered, 4 (2013) 147–152.

[2] C. Schumann, H. Michlmayr, R. Eder, A.M. del Hierro, K.D. Kulbe, G. Mathiesen, T.H.Nguyen. AMB express, 2(19) (2012) 10.1186/2191-0855-2-19.



STRUCTURAL INSIGHTS INTO HD-ZIP I OLIGOMERIZATION: EVALUATING THE PREDICTIVE ALPHAFOLD MODELS

C.E. Alvarez^a, M. Capella^b, J.A. Ibarra^b, F. Ramello^b, V. Abratti Bogdanich^{a*}, R.L. Chan^b, A.L. Arce^b

^a Centro de Estudios Fotosintéticos y Bioquímicos (CONICET), S2000LRJ Rosario, Santa Fe, Argentina

^b Instituto de Agrobiotecnología del Litoral (CONICET - UNL), 3000 Santa Fe, Santa Fe, Argentina

*valentina.abratti@gmail.com

Keywords: ALPHAFOLD; TRANSCRIPTION FACTORS; DIMERIZATION; ARABIDOPSIS; HD-ZIP

Transcription factors (TFs) are key regulatory proteins that control gene expression by binding to specific cis-regulatory DNA sequences located near or within their target genes, where they can activate or repress transcription. These regulatory mechanisms are fundamental for establishing cell identity, coordinating developmental programs, and enabling responses to environmental and physiological signals. TFs are commonly classified into families based on their DNA-binding domains. Despite being extensively studied, several aspects underlying their mode of action remain poorly understood. It has been proposed that some TFs may form dimers or trimers, to fulfill their regulatory functions. In this context, several questions arise: which oligomeric states are functionally relevant? oligomerization modes affect DNA-binding specificity or affinity? Are these interactions conserved within TF families? Are they species-specific?, among others.

In plants, the HD-Zip family of transcription factors comprises proteins containing a homeodomain (HD), as DNA-binding domain, and a leucine zipper (Zip) that serves as the dimerization domain. Subfamily I of HD-Zip TFs includes 17 members. It was corroborated in several cases that they are able to homodimerize and that this is a prerequisite to DNA binding. Regarding heterodimerization, although only a few studies have been reported, it has been observed in some cases and appears to depend on the specific interaction partner.

We performed a structural analysis using AlphaFold to predict homo- and hetero-multimeric assemblies of class I HD-Zip transcription factors, both with and without their DNA-binding sequences. Structural evaluations in PyMOL focused on validating predicted interfaces and measuring distances between residues at the *d* position in the leucine zipper to assess interaction partners and the effect of DNA inclusion (Fig. 1B). Overall, the models reproduced the expected HD–DNA and Zip interactions, with DNA sometimes influencing dimerization preference. These analyses enabled us to assess AlphaFold's predictive reliability, and its limitations compared with experimental data.

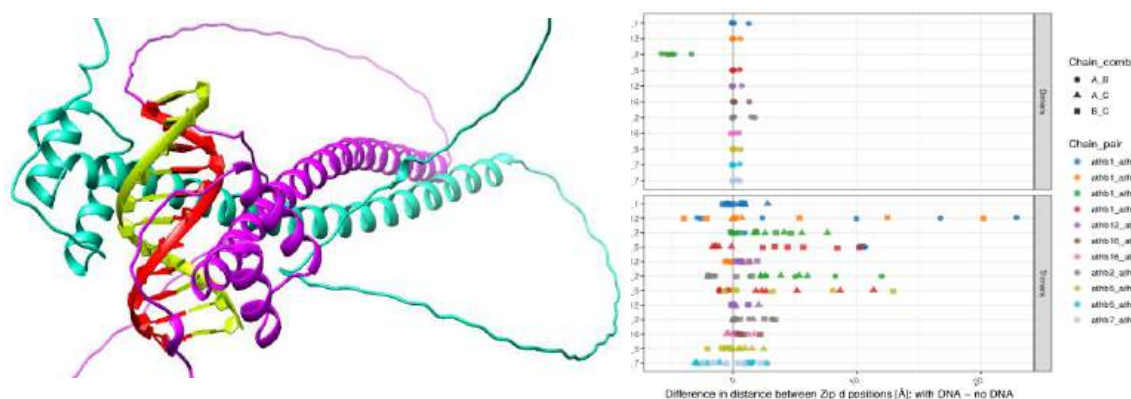


Figure 1. A. Model of the AtHB1 dimer interacting with a DNA double helix containing its binding sequence **B.** Comparison of inter-helical d-position distances in leucine zippers among dimeric and trimeric AlphaFold3 models, with and without DNA present in structure prediction.

[1] A.L. Arce, J. Raineri, M. Capella, J.V. Cabello, R.L. Chan. BMC Plant Biol. 11 (2011) 42.

[2] J. Jumper, R. Evans, A. Pritzel, T. Green, M. Figurnov, O. Ronneberger, K. Tunyasuvunakool, R. Bates, A. Židek, A. Potapenko, A. Bridgland, C. Meyer, S.A.A. Kohl, A.J. Ballard, A. Cowie, B. Romera-Paredes, S. Nikolov, R. Jain, J. Adler, T. Back, S. Petersen, D. Reiman, E. Clancy, M. Zielinski, M. Steinegger, M. Pacholska, T. Berghammer, S. Bodenstein, D. Silver, O. Vinyals, A.W. Senior, K. Kavukcuoglu, P. Kohli, D. Hassabis. Nature, 596 (2021) 583–589.



BÚSQUEDA DE NUEVOS INHIBIDORES PARA BÚSQUEDA DE NUEVOS INHIBIDORES PARA TRYPANOSOMA BRUCEI Y LEISHMANIA MEXICANA

C. Adarvez Feresin^{a*}, M. Vettorazzi^a, L. Gutierrez^a, F. Garibotto^a, J. Jampilek^b, D. Enriz^a.

^a Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia; Instituto Multidisciplinario de Investigaciones Biológicas (IMIBIO-SL). Ejército de los Andes 950, (5700) San Luis, Argentina. ^b Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Comenius University, Odbojarov 10, 83232 Bratislava, Slovakia.

*camilaadarvezferesin@gmail.com

Palabras claves: LEISHMANIA, TRYPANOSOMA, MODELADO MOLECULAR

Las enfermedades causadas por los parásitos *Leishmania* y *Trypanosoma* siguen siendo un problema de salud global desatendida, con tratamientos limitados y efectos secundarios significativos. En respuesta a esta urgente necesidad, nuestro estudio se centró en la búsqueda de nuevos compuestos inhibidores para estas patologías.

Se llevó a cabo un cribado virtual de nuevas estructuras moleculares, identificando dos compuestos prometedores que mostraron actividad biológica significativa *in vitro* contra ambos parásitos. El compuesto 1c y 4c presentaron valores de IC₅₀ [M] 1,82 y 7,84 para *leishmania* y 0,561 y 0,732 para *trypanosoma*, respectivamente.

Para comprender el mecanismo de acción a nivel molecular, se realizaron una serie de estudios computacionales avanzados. Para *Leishmania mexicana*, se evaluaron las proteínas tripanotiona reductasa (PDB 6IU1) [1] y arginasa (PDB 4IU1) [2], mientras que para *Trypanosoma brucei* se estudió únicamente la tripanotiona reductasa (PDB 6OEZ) [3].

Para los distintos blancos moleculares en ambos parásitos se llevaron a cabo diferentes estudios *in silico*:

- Docking Molecular: se acoplaron virtualmente los dos compuestos activos en los sitios de unión de las proteínas objetivo. Los resultados de docking mostraron una alta afinidad y un ajuste favorable de los compuestos en los sitios activos de estas enzimas.
- Dinámica Molecular: se realizaron simulaciones para evaluar la estabilidad de los complejos formados entre los compuestos y las proteínas a lo largo de 100ns por triplicado, confirmando que las interacciones observadas en el docking son estables y viables en un entorno dinámico. En el caso de la arginasa, dado que el sitio activo de la enzima contiene dos iones Mn⁺², la parametrización de los metales y su entorno de coordinación se llevó a cabo utilizando la herramienta MCPB.py del paquete Amber22 [4]. Esta metodología permitió generar un campo de fuerza específico y preciso para los centros metálicos, asegurando la confiabilidad de las simulaciones posteriores.
- Análisis de Descomposición por Residuos: este análisis permitió identificar los aminoácidos clave en los sitios activos de las proteínas que contribuyen de manera más significativa a la energía de unión con los compuestos, proporcionando un conocimiento detallado de las interacciones moleculares.
- Análisis QTAIM (Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas): este estudio más profundo se utilizó para caracterizar la naturaleza de las interacciones químicas (p. ej., enlaces de hidrógeno, interacciones de Van der Waals) entre los compuestos y las proteínas a un nivel electrónico.

Nuestros hallazgos demuestran que los dos compuestos identificados son inhibidores duales potenciales, dirigidos a proteínas que son esenciales y específicas para estos parásitos. La tripanotiona reductasa y la arginasa no tienen contrapartes en el hospedador humano, lo que sugiere que estos compuestos podrían tener una toxicidad mínima y ser candidatos prometedores para el desarrollo de nuevos fármacos. Los estudios *in silico* realizados proporcionan una base sólida para futuros ensayos biológicos y validación *in vivo*.

[1] A. Revuelto, M. Ruiz-Santaquiteria, H. de Lucio, A. Gamo, A.A. Carriles, K.J. Gutiérrez, P.A. Sánchez-Murcia, J.A. Hermoso, F. Gago, M.-J. Camarasa, A. Jiménez-Ruiz, S. Velázquez. ACS Infect. Dis., 5 (2019) 596–604.

[2] E.L D'Antonio, B. Ullman, S.C. Roberts, U. G. Dixit, M.E. Wilson, Y. Hai, D.W. Christianson. Arch. Biochem. Biophys., 535 (2013) 163–176.

[3] R. De Gasparo, O. Halgas, D. Harangozo, M. Kaiser, E.F. Pai, R.L. Krauth-Siegel, F. Diederich. Chem. Eur. J., 25 (2019) 11416–11421.

[4] P. Li, K. M. Jr. Merz, J. Chem. Inf. Model., 56 (2016) 599–604.



XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



MAPEO DEL SITIO DE UNIÓN DEL SALBUTAMOL MEDIANTE SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL. ¿QUÉ TAN SIMPLE ES EL CONCEPTO DE TRES PUNTOS DE UNIÓN?

C. Adarvez Feresin^{a*}, O. Parravicini^a, A. Garro^a, F. Suvire^a, R. Tosso^a

^a Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia; Instituto Multidisciplinario de Investigaciones Biológicas (IMIBIO-SL). Ejército de los Andes 950, (5700) San Luis, Argentina.

* camilaadarvezferesin@gmail.com

Palabras claves: DROGAS QUIRALES, SALBUTAMOL, INTERACCIONES MOLECULARES, QTAIM

Reportamos por primera vez la superficie de la energía potencial conformacional (PES) del salbutamol, un fármaco quiral bien conocido. Así, evaluamos en detalle la topografía del sitio de unión de este fármaco quiral interactuando con los diferentes aminoácidos ubicados en el bolsillo de unión del receptor adrenérgico β_2 (β_2 AR). Estos cálculos consideraron todos los efectos de su entorno en condiciones biológicas; y por lo tanto, nuestro estudio tiene en cuenta importantes aspectos conformacionales y electrónicos que se han omitido en estudios previos. Se han utilizado diferentes niveles de teoría para caracterizar el espacio conformacional del ligando (obtener la PES), desde cálculos simples de dinámica molecular (MD) hasta cálculos combinados de mecánica molecular, semiempíricos y DFT, para ver el alcance y las limitaciones de estos diferentes enfoques. Es muy importante resaltar que el uso de PES conformacional nos permite visualizar, desde la perspectiva de los diferentes enantiómeros, los aspectos topográficos del receptor que facilitan o dificultan la formación de sus respectivos complejos. Por lo tanto, todos los puntos críticos (mínimos, estados de transición y máximos), así como las vías de interconversión conformacional, son posibles de observar mediante el uso de estos PES. Dicha información no es posible obtener mediante el uso de otras metodologías teóricas o experimentales.

Previamente hemos utilizado este tipo de estudios en diferentes sistemas de interés en química medicinal, demostrando la gran utilidad de estas técnicas para evaluar la flexibilidad conformacional de ligandos en su sitio de acción [1-3]. Por otro lado, empleamos cálculos refinados de la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (QTAIM) para evaluar en detalle las interacciones moleculares que estabilizan o desestabilizan los diferentes complejos ligando-receptor (L-R). Los avances esenciales en estas simulaciones son dobles, consisten en llevar a cabo un estudio conformacional sistemático y completo a partir de PES de un fármaco quiral e introducir cálculos QTAIM para evaluar con mayor precisión las interacciones moleculares que estabilizan los diferentes complejos. Para llevar a cabo este estudio, hemos seleccionado salbutamol, un conocido fármaco quiral cuyos enantiómeros exhiben diferentes propiedades farmacológicas (la actividad broncodilatadora es significativamente mayor en el isómero (R)). Nuestros resultados nos permiten comprender a nivel molecular el diferente comportamiento estereoelectrónico de ambos enantiómeros del salbutamol y, por consiguiente, sus distintas actividades biológicas. Nuestras simulaciones indican que, en este caso, el concepto de tres puntos de unión de Easson y Stedman constituye un enfoque muy adecuado para explicar el comportamiento farmacológico del salbutamol. Por otro lado, nuestros resultados indican que los enantiómeros y la conformación son características inseparables que deben abordarse conjuntamente en el análisis de la relación estereoestructura-actividad de los fármacos quirales.

[1] A. Schiel, R.D. Tosso, E. Angelina, A. García, N. Hennuyer, D. Cortes, N. Cabedo, R.D. Enriz, J. Chem. Inf. Model. 65 (2025) 298–311.

[2] L. Gutierrez, P. Peršolja, R. Tosso, N. Zidar, D. Kikelj, R.D. Enriz, RSC Med. Chem. 15 (2024) 3759–3777.

[3] R.D. Tosso, M.N.C. Zarycz, A. Schiel, L. Goicoechea Moro, H.A. Baldoni, E. Angelina, R.D. Enriz, J. Comp. Chem. 43 (2022) 1298–131.



CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS-X Y MÉTODOS COMPLEMENTARIOS PARA EL ESTUDIO ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS DE *TRYPANOSOMA CRUZI*

I.M. Cabrera^a, N.E. Carmona Viglianco^a, J.M. Zarate^a, J.A. Gomez Barroso^{a*}

^a Laboratorio de Biología Molecular Estructural, Fac. de Qca. Bca. y Fcia, UNSL - IMIBIO Conicet

*jagomez@email.unsl.edu.ar

Palabras claves: CHAGAS; *TRYPANOSOMA CRUZI*; CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS-X; BIOINFORMÁTICA; BIOLOGÍA ESTRUCTURAL

La enfermedad de Chagas es causada por el parásito protozoario *Trypanosoma cruzi*. Es una Enfermedad Tropical Desatendida, con una alta prevalencia global con 6-8 millones de casos y 65-100 millones de personas están en riesgo de contraer esta infección. Es endémica en América Latina donde afecta a 18-20 millones de personas. Actualmente, no hay vacunas disponibles y los medicamentos utilizados en pacientes muestran varios efectos secundarios indeseables [1]. La identificación de nuevos blancos proteicos para quimioterapia es una prioridad para avanzar en el control de la enfermedad de Chagas. La cristalografía de rayos X es una poderosa herramienta que junto a métodos complementarios, principalmente bioinformáticos como el modelado y el docking *in silico*, son herramientas importantes para la caracterización estructural. En este trabajo, estudiamos varias proteínas de *T. cruzi* involucradas en procesos importantes como la expresión proteica, el metabolismo energético y la maduración del ARNm. Proteínas clave involucradas en estos procesos celulares, son potenciales objetivos para el diseño racional de fármacos. El tallo ribosómico es un complejo pentamérico formado por cinco proteínas P: TcP0, TcP1 α , TcP1 β , TcP2 α y TcP2 β . Estas proteínas poseen una región intrínsecamente desordenada (IDR) que ha influido negativamente en estrategias cristalográficas. Nuestro grupo ha obtenido modelos *in silico* para estas proteínas y se ha propuesto un modelo pentamérico utilizando el programa Modeller y AlphaFold2 y apoyado en estudios biofísicos y moleculares. El modelo TcP0 tiene un dominio globular N-terminal unido a un dominio alfa, mientras que las cuatro proteínas pequeñas P tienen un dominio N-terminal de manojo de cuatro hélices [2]. Las cinco proteínas P tienen un dominio C-terminal desordenado que termina en un ácido. Nuestro grupo también estudia proteínas clave del metabolismo energético como las Adenilato Kinasas (TcAdK1 y otras) y las Nucleósido Difosfato Kinasas (TcNDPK1, 2 y 3). Se ha descrito una estructura cristalográfica quinaria para TcNDPK1 como un oligómero multihexamérico tipo hélice, lo que sugiere un modelo para la regulación y el almacenamiento enzimático [3]. La proteína TcAdK1 se cristalizó y se están realizando ensayos de rayos X. Diferentes estudios bioinformáticos sugieren un modelo de regulación de su actividad que involucra cambios conformacionales en la región alfa N-terminal para esta proteína. Se propuso un modelo de homología de tres dominios para TcNDPK2 y se ha estudiado su unión a tubulina. Esta es una proteína difícil de obtener en calidad necesaria para estudios estructurales, probablemente debido a su tamaño y la flexibilidad entre sus dominios. Para las proteínas involucradas en el proceso de maduración del ARNm: el factor de interacción TcPap1 (TcFIP1-like) y el factor específico de clivaje y poliadenilación (TcCPSF-30). Se ha propuesto un modelo de interacción para estas proteínas junto a TcPAP1 por métodos bioinformáticos y basados en experiencias biofísicas y moleculares. TcCPSF30 y TcFIP1-like son proteínas intrínsecamente desordenadas (IDP) lo que dificulta su estudio por métodos cristalográficos. Finalmente, se obtuvieron cristales de la proteína TcBDF2 (factor con bromodominio 2) para realizar ensayos de difracción de rayos-x. Los estudios por cristalografía de rayos-x en integralidad con estudios biofísicos y bioinformáticos son importantes para la caracterización tridimensional de proteínas en el diseño racional de fármacos para el tratamiento de la enfermedad de Chagas.

[1] S.M. Teixeira, G.A. Burle-Caldas, J.T. Castro, R.T. Gazzinelli, Lancet regional health. Americas, 45 (2025) 101059

[2] J.A. Gomez Barroso, C.F. Aguilar, Eur. Biophys. J., 43(8–9) (2014) 361–366.

[3] J.A. Gomez Barroso, M.R. Miranda, C.A. Pereira, R.C. Garratt, C.F. Aguilar, Acta Crystallogr. D Struct. Biol. 78(1) (2022) 30–42.



MOLECULAR MECHANISM OF β -LACTAM SENSING BY THE VbrK SENSOR KINASE AND ITS ASSOCIATION WITH VbrC IN *VIBRIO PARAHAEMOLYTICUS*

I.G. Palanca^{a*}, I.P. Suarez^a, M.J. Marcaida^b, L.A. Abriata^b, M. Dal Peraro^b, L.I. Llarrull^{a,c}

^a Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) - Rosario - Santa Fe - Argentina.

^b École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), School of Life Sciences, Interschool Institute of Bioengineering – Lausanne, Switzerland.

^c Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario - Rosario - Santa Fe - Argentina.

*palanca@ibr-conicet.gov.ar

Palabras claves: ANTIBIOTIC RESISTANCE, TWO-COMPONENT SYSTEM, β -LACTAMS, VbrK

The increasing prevalence of antibiotic-resistant bacteria represents a significant public health challenge. In this context, *Vibrio parahaemolyticus* stands as one of the major causes of seafood-related acute gastroenteritis which can lead to severe infections in immunocompromised individuals [1-2]. This bacterium was among the first *Vibrio* species reported to produce broad-spectrum β -lactamases, highlighting the risk of resistance gene dissemination within the genus [3]. The two-component system VbrKR is induced by β -lactam antibiotics and regulates the expression of the β -lactamase CARB [4]. The VbrKR system involves a membrane-anchored histidine kinase (VbrK) and a cytoplasmic response regulator (VbrR). We aim at elucidating the molecular mechanism underlying antibiotic recognition and signal transduction by VbrK. Our goal is to contribute to the development of new inhibitors for this system and restore the bacteria's antibiotic sensitivity.

Our research focused on VbrK^{SD}, a soluble construct encompassing the periplasmic domain of VbrK, which is presumed to be responsible for β -lactam detection. Saturation transfer difference (STD) NMR experiments revealed that β -lactams interact non-covalently with VbrK^{SD} only after reduction of one of its two disulfide bonds. Stopped-flow kinetics indicated that reduced VbrK^{SD} not only binds but also slowly hydrolyzes β -lactams via a two-step mechanism involving initial formation of a non-covalent Michaelis complex, followed by covalent adduct formation and hydrolysis. Mutational analysis identified Cys86 as essential for this activity. In addition, HSQC NMR experiments comparing the reduced wild type sensor domain with the Cys86Ala and Cys107Ala mutant versions confirmed that the reduced disulfide bond is C86-C107. The X-ray structure of reduced VbrK^{SD} (2.7 Å resolution) showed structural changes in the distal region of the protein, specifically in α -helix 7, which rotates and shifts slightly upon disulfide bond opening. This helix harbors C86 and lies within the putative β -lactam binding site. Formation of the covalent β -lactam-VbrK^{SD} intermediate was confirmed using a fluorescent β -lactam probe.

Genomic analysis of the *vbrKR* locus identified three additional genes, including *vbrC*. Structural modeling with AlphaFold3 suggested an interaction between VbrK^{SD} and VbrC, a periplasmic protein of unknown function. This interaction was validated by gel filtration, isothermal titration calorimetry (ITC), analytical ultracentrifugation, and X-ray crystallography. VbrC interacts with VbrK^{SD} with high affinity, and the X-ray structure of the complex (3.6 Å resolution) revealed that the interaction surface is mediated by a three-helix bundle from VbrC and primarily by α -helices 7 and 6 from VbrK^{SD}.

Our results show that binding of β -lactams to the periplasmic/sensor domain of VbrK is regulated by the formation of a disulfide bond and that the interaction leads to formation of a covalent adduct. Furthermore, the interaction between VbrK^{SD} and VbrC suggests the existence of a more complex regulatory network for activation of the VbrKR two-component system.

[1] A. Lima, Curr. Opin. Infect. Dis. 14 (2001) 547–52.

[2] C.C. Hou, C.C. Lai, W.L. Liu, C.M. Chao, Y.H. Chiu, P.R. Hsueh, Eur. J. Clin. Microbiol. Infect. Dis. 30 (2011) 819–824.

[3] J. Chiou, R. Li, S. Chen, Antimicrob. Agents Chemother. 59 (2015) 3593–3595.

[4] L. Li, Q. Wang, H. Zhang, M. Yang, M.I. Khan, X. Zhou, PNAS, 113 (2016) 1648–1653.



XIII Taller de la Asociación Argentina de Cristalografía

7 de noviembre

Conferencias Semiplenarias

TALLER





**XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr**
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



**UN EJEMPLO DE LA CONTRIBUCIÓN DE TÉCNICAS MINERALÓGICAS A LA ESTIMACIÓN
DEL POTENCIAL DE DRENAJE ÁCIDO Y LIXIVIACIÓN DE METALES DESDE
ESCOMBRERAS
C. De Los Hoyos**

SRK Consulting (Argentina) S.A., Salta, Argentina
cdeloshoyos@srk.com.ar

Los estudios mineralógicos son un complemento esencial en la interpretación del potencial de generación de drenaje ácido y lixiviación de metales de los materiales que componen los residuos mineros. Para obtener información sobre la proporción entre materiales productores de ácido, neutralizantes e inertes, se aplicaron dos tipos de análisis diferentes: Difractometría de Rayos X (DRX) y Mineral Liberation Analysis (MLA), esta última es una técnica de mineralogía automatizada. Para ambas técnicas, se seleccionaron 22 muestras representativas de rajos abiertos, testigos de perforación diamantina y escombreras. Ambas técnicas coincidieron en la identificación de minerales neutralizantes e inertes, aunque la técnica MLA fue la apropiada para la identificación de pirita (productor de ácido), así como para evaluar su tamaño, abundancia, hábito y relación textural con los minerales neutralizantes e inertes. En general, las muestras representativas de rajos abiertos y escombreras del sector sur y oriental presentan pirita, en proporciones potencialmente capaces de generar drenaje ácido y asociados a silicatos de potencialidad de neutralización inerte o lenta (cuarzo, ortosa, muscovita, albita e illita). No se observó relación textural que indique que los sulfuros reactivos estén aislados o encapsulados, por lo que son propensos a reaccionar para formar ácido en condiciones de suficiente agua y oxígeno disuelto. Los resultados de la mineralogía aplicada fueron consistentes con los obtenidos mediante ensayos geoquímicos estáticos.



**XX REUNIÓN ANUAL
DE LA AACr**
San Luis, 5 al 7 de noviembre de 2025



QUÍMICA Y CONTROL DE CALIDAD EN LA PRODUCCIÓN DE CEMENTO: ENSAYOS DE LABORATORIO Y CARACTERIZACIÓN COMO SOPORTE AL PROCESO INDUSTRIAL

A. A. Godoy^{a*}, L.G. Faienza^a

^a Ingeniería de Control de Procesos, Cementos Avellaneda S. A. - Planta La Calera, San Luis.

*agustin.godoy@cemavellaneda.com.ar

Palabras claves: CEMENTO PORTLAND; CONTROL DE CALIDAD; CLÍNKER; CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES; SOSTENIBILIDAD.

El cemento Portland constituye el material de construcción de mayor uso a nivel mundial y su desempeño depende en gran medida de un control de calidad sistemático a lo largo de todo el proceso productivo. La producción industrial involucra la transformación de materias primas calizas y arcillosas en clínker a través de un proceso de alta temperatura en hornos rotatorios, seguido por la molienda con adiciones específicas para obtener el cemento comercial. En este contexto, el laboratorio desempeña un rol esencial al garantizar que el producto final cumpla con los estándares técnicos y de durabilidad requeridos.

La exposición abordará, en primer lugar, una descripción sintética del proceso productivo, para luego focalizar en las metodologías de control de calidad utilizadas en la industria. Se discutirán las principales técnicas analíticas: métodos químicos clásicos y modernos para determinar la composición elemental; difracción de rayos X como herramienta para identificar y cuantificar fases cristalinas en clínker y cementos; microscopía óptica y electrónica para el estudio de morfología y textura; y ensayos físicos normalizados que evalúan propiedades tecnológicamente relevantes como tiempos de fraguado y resistencia mecánica [1,2]. Asimismo, se presentarán ejemplos ilustrativos de la influencia de la mineralogía del clínker y de la estabilización de fases en el comportamiento del cemento hidratado.

Finalmente, se plantearán los desafíos actuales de la industria cementera en relación con la sostenibilidad y la reducción de emisiones de CO₂, destacando la importancia de la caracterización integral de materiales como puente entre la química fundamental y las necesidades tecnológicas [3]. La participación se realiza en representación de Cementos Avellaneda, aportando la perspectiva de una empresa referente en el sector [4].



Figura 1. Esquema del proceso de producción y caracterización del cemento Portland.

[1] W. H. Duda. *Cement Data Book*, 3rd Ed. Bauverlag, Wiesbaden, 1985.

[2] IRAM – Instituto Argentino de Normalización y Certificación. *Normas IRAM aplicables a cementos y materiales de construcción*. <https://iram.org.ar>

[3] Global Cement and Concrete Association (GCCA). *Sustainability and Climate Change*. <https://gccassociation.org>.

[4] <https://www.cementosavellaneda.com.ar>.



MATERIALES CRISTALINOS MULTICOMPONENTE COMO ESTRATEGIA PARA EL DISEÑO DE FÁRMACOS

F. Di Salvo

Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE, CONICET-UBA), CABA, Argentina.

flor@qi.fcen.uba.ar

Palabras claves: INGENIERÍA CRISTALINA DE FÁRMACOS; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; CRISTALES MULTICOMPONENTES

La ingeniería cristalina (IC), disciplina que tiene como objetivo el diseño de nuevos materiales cristalinos funcionales, se posiciona como una estrategia innovadora para mejorar diferentes propiedades de ingredientes farmacéuticos activos (IFAs). Mediante la obtención de nuevas formas cristalinas, es posible optimizar la solubilidad, biodisponibilidad y estabilidad de los fármacos, permitiendo el desarrollo de tratamientos más eficaces y seguros. Dentro de la diversidad de formas en las que se pueden presentar los sólidos cristalinos, encontramos los polimorfos y a los denominados “cristales multicomponente” (CMs), los cuales corresponden a solvatos/hidratos, cocrystalos y sales [2]. En base a las investigaciones más recientes, se considera que la formación de CMs podría ser la herramienta para enfrentar el grave problema de baja solubilidad que presentan los fármacos comerciales clasificados como BCS II y IV (Sistema de Clasificación Biofarmacéutica – Biopharmaceutics Classification System–) [3].

En esta charla se presentarán estrategias empleadas para el diseño y síntesis de CMs de IFAs empleado contraiones (para las sales) y coformadores (para los cocrystalos) que corresponden a especies consideradas como “GRAS” (Generally Recognized As Safe), a partir del diseño racional tomando como referencia las características estructurales, las propiedades fisicoquímicas de cada componente y el tipo de interacción esperada en los sólidos cristalinos diseñados. Se discutirán algunos casos de estudio y el rol de las técnicas de difracción de rayos X como eje central para el diseño racional de nuevos fármacos.

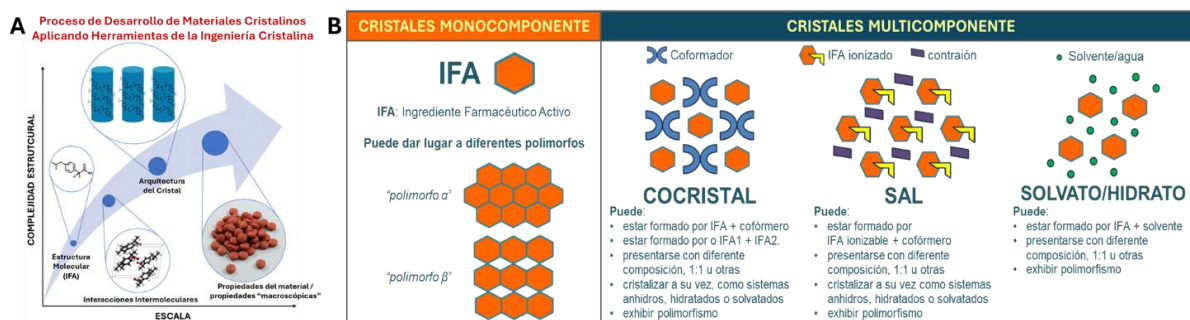


Figura 1. Representación esquemática del diseño de fármacos empleado la IC (imagen adaptada de : https://www.wikiwand.com/en/Crystal_engineering) (A). Diversidad de Formas cristalinas en IFAs (imagen adaptada de la ref. [4] (B).

- [1] G.R. Desiraju, J. Am. Chem. Soc., 135(27) (2013) 9952–9967.
- [2] J. Bernstein, Polymorphism in Molecular Crystals, Oxford University Press, New York, 2020.
- [3] R. Samineni, J. Chimakurthy, S. Konidala, Turkish J. Pharm. Sci. 19(6) (2022) 706–713.
- [4] J.B. Ngilirabanga, H. Samsodien. Nano Select, 2(3) (2021) 512–526.





CUANTIFICACIÓN DE LA CAPTURA DE CO₂ EN PASTAS DE CAL Y ARCILLA CAOLINÍTICA CALCINADA UTILIZANDO DIFRACCIÓN DE RAYOS X

L. Aristarán^{a*}, A. Mocciaro^b, C. Garayzabal^b, C. Paulo^a, A. Tironi^a

^a Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Provincia de Buenos Aires (CONICET-CICPBA-UNCPBA), Olavarría, Argentina.

^b Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CONICET-CICPBA-UNLP), Gonnet, Argentina.

*luisina.aristaran@gmail.com

Palabras claves: CAL HIDRÁULICA; ARCILLA CAOLINÍTICA CALCINADA; CO₂; MÉTODO RIETVELD

En la actualidad, morteros de cal son utilizados para la restauración y protección de edificios históricos por su alta compatibilidad con los materiales de la época, así como también en la construcción de edificios modernos debido a las propiedades que brinda de respirabilidad y flexibilidad [1]. Durante la producción de cal ocurre la descarbonatación de la calcita (CaCO₃) para obtener Ca(OH)₂ (portlandita), principal componente de la cal, emitiendo CO₂ a la atmósfera. Por otro lado, el uso de cal como materia prima en morteros y pastas favorece la captura de CO₂ ambiental, al reaccionar la portlandita con el CO₂ produciendo calcita (reacción carbonatación). El reemplazo parcial de cal por arcillas caoliníticas calcinadas disminuye la emisión de CO₂ asociada al mortero y mejora sus propiedades mecánicas [2]. Además, modifica la velocidad y capacidad de captación de CO₂, debido a la competencia del uso de portlandita como reactivo en la reacción puzolánica y en la reacción de carbonatación. El objetivo de este trabajo es analizar cómo se modifica la captación de CO₂ en pastas de cal cuando se agrega arcilla caolinítica calcinada, cuantificando las fases cristalinas mediante el refinamiento de los patrones de rayos X por el método Rietveld y usando patrón interno para estimar la cantidad de fase no difractante.

Se elaboraron pastas reemplazando cal hidráulica (CalH) por arcilla caolinítica calcinada (KC) en un 0, 30 y 50% (CalH, CalH30KC, CalH50KC). Las pastas fueron almacenadas en cámara húmeda por 28 días y luego de ese período se frenó la hidratación de la mitad de las pastas con isopropanol (28d), exponiendo las restantes a carbonatación natural en ambiente rural durante 1 mes (28d+1m). Para todas las pastas se identificaron las fases hidratadas y carbonatadas mediante DRX (Bruker D8 Advanced), identificando calcita (Cc) obtenida como producto de la reacción de carbonatación y presente en la materia prima; monocarboaluminato cálcico (Mc) obtenido como producto de la reacción puzolánica; belita (C₂S), cuarzo (Q) y portlandita (CH) presentes en la materia prima. Se observa con el avance de las reacciones de hidratación y carbonatación la disminución de la intensidad de CH y el aumento de la intensidad de Cc.

Se refinaron los parámetros estructurales con el método de Rietveld utilizando el programa FullProf y el método del patrón interno (20 %p/p corindón) para la estimación de la fase no difractante. El porcentaje en peso de calcita formada por carbonatación mediante la captación de CO₂ ambiental (Cc_{Carb}) se calculó a partir de la ecuación ($Cc_{Carb} = Cc_{Rietv} - [(100 - \%R)/100 * Cc_{CalH} - Cc_{Mc}]$), considerado el porcentaje de Cc determinado por método Rietveld en las pastas (Cc_{Rietv}), el contenido de Cc en la cal hidráulica (Cc_{CalH} = 22,0 ± 0,7 %), el porcentaje de reemplazo (%R) y la calcita contenida en la cal hidráulica que fue consumida en la formación de Mc, en el caso de las pastas elaboradas con KC (Tabla 1). Finalmente se calcularon las toneladas de CO₂

Tabla 1. Resultados cuantificación de captura CO₂.

Pasta	%Cc _{Rietv}	%Mc _{Rietv}	%Cc _{Carb}	T _{CO2} /T _{Pasta}
CalH _{28d}	30,2 ± 0,7	0,0 ± 0,0	8,2	0,03
CalH30KC _{28d}	20,4 ± 0,4	9,5 ± 0,6	6,0	0,02
CalH50KC _{28d}	15,6 ± 0,5	11,5 ± 0,7	5,9	0,02
CalH _{28d+1m}	45,2 ± 0,7	0,0 ± 0,0	23,1	0,09
CalH30KC _{28d+1m}	24,8 ± 0,5	8,2 ± 0,7	10,3	0,04
CalH50KC _{28d+1m}	29,3 ± 0,5	6,8 ± 0,7	19,1	0,08

captadas por tonelada de pasta (T_{CO2}/T_{Pasta}). El método Rietveld con patrón interno permitió estimar la captación de CO₂. Los resultados muestran que, si bien el agregado de arcilla caolinítica calcinada mejora las propiedades de los morteros de cal, disminuye ligeramente la captura de CO₂ respecto de la referencia (CalH), factor relevante desde el punto de vista ambiental.

[1] S.-H. Kang, S.-O. Lee, S.-G. Hong, Y.-H. Kwon, Sustainability, 11 (2019) 5169.

[2] L. Aristarán, A. Tironi, C. Iraporda, G. Cordoba, C. Paulo, Memorias del XI AATH (2024), 50–57.

**EVALUACIÓN DE LA INCORPORACIÓN DE LITIO EN CARNALITAS $\text{KMgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$:
RESULTADOS EXPERIMENTALES Y TEÓRICOS****N.L. Chiaramonte^{1*}, M.C. Blanco¹, M.G. García^{1,2}, G. Lener^{1,3}, D.A. Vega^{1,4}, F. Colombo^{1,2}**

¹ Centro de Investigaciones en Ciencias de la Tierra, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas-Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

² Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

³ Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

⁴ Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur.

*nati.chiaramonte@gmail.com

Palabras claves: CARNALITA; LITIO; XPS; SÍNTESIS; DFT

El mineral carnalita, $\text{KMgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, precipita en algunos salares y piletas de evaporación a partir de salmueras cloruradas magnésicas, presentes en plantas de recuperación de litio (Li) [1]. Dado que se conoce un análogo sintético del Li (Li-carnalita), $(\text{LiH}_2\text{O})\text{MgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ [2], resulta de interés evaluar si el Li puede sustituir al potasio (K) en la estructura de la carnalita, y en qué proporciones, actuando así como un posible sumidero de Li, bajo condiciones relevantes para las salmueras del Altiplano-Puna de Sudamérica, una de las principales regiones productoras de Li a nivel mundial.

Con el objetivo de evaluar la incorporación de Li en la estructura de las carnalitas, se realizaron ensayos de síntesis mineral a partir de soluciones acuosas de LiCl, KCl y $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, manteniendo constante la proporción de Mg y variando progresivamente la concentración de Li. Se trabajó con relaciones molares K:Li de 10:0, 8:2, 6:4, 4:6, 2:8 y 0:10. Los ensayos se llevaron a cabo a temperatura ambiente ($\sim 20^\circ\text{C}$), y los sólidos obtenidos fueron caracterizados mediante difracción de rayos X (polvo y monocristal), ICP-OES, MEB/EDS y espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS). Adicionalmente, se realizaron cálculos de Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para modelar la posible incorporación de Li en la estructura cristalina de dicho mineral.

Los valores preliminares indican que el contenido máximo de Li que puede incorporarse en la estructura de la carnalita es de aproximadamente 0,32 % en peso, independientemente de la relación molar Li/K de la solución. El refinamiento estructural de monocristales, a partir de datos recolectados a 100 K y 150 K, muestra que la carnalita no experimenta transiciones de fase a bajas temperaturas. Según los cálculos DFT, el Li reemplaza al K en el sitio K(2), ingresando como una unidad $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})^+$. El litio se encuentra tetraédricamente coordinado por tres átomos de Cl_1 y uno de O_2 , mientras que los dos protones de la molécula de H_2O forman enlaces de hidrógeno con dos átomos de Cl. Esta disposición estructural coincide con la observada en la carnalita de Li sintética. La incorporación de $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})^+$ produce una expansión de la celda unidad y un cambio de simetría a triclinica (al menos a escala de celda unidad). Los espectros XPS muestran que la carnalita se descompone en alto vacío, pero sugieren que el Li no ingresa en ninguno de los sitios ocupados por Mg.

Además de poseer un campo de estabilidad relativamente restringido [3], la formación natural de la “Li-carnalita” parece estar limitada a condiciones en las que tanto el Mg como el Li se encuentren presentes en concentraciones elevadas. Su ocurrencia natural podría restringirse a inclusiones fluidas o en salmueras.

A partir de los resultados obtenidos, se puede inferir que la carnalita no constituye un sumidero significativo de litio, a menos que precipite en grandes cantidades. Su estabilidad a bajas temperaturas sugiere una posible detección en materiales extraterrestres, aunque su fuerte tendencia a deshidratarse limita su preservación a bajas presiones.

[1] J.J. Pueyo, G. Chong, C. Ayora, Chem. Geol., 466 (2017) 173–186.

[2] H. Schmidt, B. Euler, W. Voigt, G. Heide, Acta Crystallogr. Sect. C, 6 (9) (2009) i57–i59.

[3] H. Pöhlmann, U. König, Minerals, 11(10) (2021), 1058.



ESTUDIO *IN SITU* DE LA CARBONATACIÓN DE Li_3BO_3 MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS X

M.J. Orozco^{a,b,*}, M.L. Grasso^c, P. Alonso-Sanchez^d, F. Cova^e, M.L. Rodríguez^a, M.V. Blanco^f, F. Gennari^{b,c}

^a Instituto de Investigación en Tecnología Química (INTEQUI-UNSL/CONICET), Almirante Brown 1450, 5700 San Luis, Argentina.

^b Universidad Nacional de Cuyo (Instituto Balseiro), Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500, R8402AGP, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina.

^c Dpto. Fisicoquímica de Materiales, Gerencia de Investigación Aplicada, Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500, R8402AGP, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina.

^d Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), CSIC-Universidad de Zaragoza, C/ Pedro Cerbuna 12, 50009, Zaragoza, España.

^e Sincrotrón ALBA, Carrer de la Llum 2-26, 08290 Cerdanyola del Vallés 08290, España.

^f Instituto Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC, 08193 Bellaterra, Catalunya, España.

* maria.orocho@ib.edu.ar

Palabras claves: BORATOS DE LITIO; *IN SITU* XRD; RIETVELD; CARBONATACIÓN; CAPTURA DE CO_2

El triborato de litio (Li_3BO_3) es un absorbente de CO_2 prometedor para procesos de captura poscombustión. Su alta capacidad de absorción, excelente regenerabilidad y rápida cinética, lo posiciona como una alternativa viable a los absorbentes de litio convencionales. La reacción de carbonatación de Li_3BO_3 implica la formación de carbonato de litio (Li_2CO_3) y boratos de litio, como $\text{Li}_6\text{B}_4\text{O}_9$ y LiBO_2 , con una cinética fuertemente influenciada por la presión parcial y la temperatura de CO_2 . Sin embargo, la dinámica fundamental a alta temperatura que controla su formación y carbonatación permanece en gran medida inexplorada.

En este trabajo, se analiza la evolución de las fases formadas en la carbonatación mediante mediciones de difracción de rayos X (XRD) *in situ* en sincrotrón en la estación BM01 de la línea suizo-noruega (SNBL) del European Synchrotron Radiation Facility (ESRF). Las muestras de Li_3BO_3 fueron calentadas desde temperatura ambiente hasta 650°C con una rampa de $5^\circ\text{C}/\text{min}$ en condiciones controladas de flujo gaseoso con 10% y 100% de CO_2 . Los datos recopilados fueron procesados empleando diferentes programas de procesamiento y ajuste [1].

Los resultados muestran que el Li_3BO_3 permanece sin reaccionar hasta 450°C , donde inicia la carbonatación con formación de Li_2CO_3 y $\text{Li}_6\text{B}_4\text{O}_9$, que coexisten con el Li_3BO_3 inicial. A 580°C y bajo 10% de CO_2 , se obtiene un patrón complejo, como el mostrado en la Figura 1. En estas condiciones, se identifican las fases Li_3BO_3 , Li_2CO_3 , $\text{Li}_6\text{B}_4\text{O}_9$ y una solución sólida mixta $\text{Li}_{2+x}\text{C}_{1-x}\text{B}_x\text{O}_3$. Esta última se ha obtenido por reacción en estado sólido de mezclas Li_2CO_3 - Li_3BO_3 [2], siendo isoestructural con Li_2CO_3 [3]. El refinamiento estructural revela que el B sustituye al C en la red cristalina, mientras que el Li se incorpora intersticialmente en una posición Wyckoff 000, con x decreciendo de 0,3 a 0 con la temperatura. Finalmente, la muestra se descarbonata y el Li_3BO_3 se regenera completamente a 620°C .

Esto indica que la carbonatación/descarbonatación ocurre mediante una secuencia compleja de formación competitiva y posiblemente secuencial de múltiples fases cristalinas.

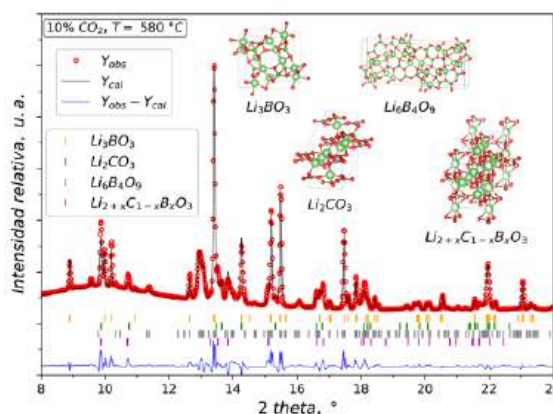


Figura 1. Patrón XRD *in situ* durante la carbonatación de Li_3BO_3 bajo 10% de CO_2 a 580°C , con los refinamientos de Rietveld.

[1] O. Arcelus, J. Rodríguez-Carvajal, N. A. Katcho, M. Reynaud, A. P. Black, J. Appl. Crystallogr. 57 (2024) 1676–1690.

[2] K. Nagao, A. Hayashi, M. Tatsumisago, J. Ceram. Soc. Jpn. 124 (2016) 915–919.

[3] R.D. Shannon, B.E. Taylor, A.D. English, T. Berzins, Electrochimica Acta 22 (1977) 783–796.



ESTUDIO DE LA EVOLUCIÓN MICROESTRUCTURAL DEL HIDRÓXIDO DE ALUMINIO

C. Corvalán Moya^{a,b,c,*}, E. Linardi^{a,b}

^a Gerencia de Materiales, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), ^b Dpto. de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de Tres de Febrero (UNTREF), ^c Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

* ccmoya@untref.edu.ar

Palabras claves: ALUMINIO; BAYERITA; BOEHMITA

En Argentina, los elementos combustibles (EECC) para los reactores nucleares experimentales se fabrican con la aleación de aluminio AA6061. Al finalizar su vida útil en los reactores, los EECC se almacenan de forma interina en piletas con agua desmineralizada a temperatura ambiente durante un tiempo que puede extenderse hasta 40 años. Luego, se les realiza un proceso de secado para trasladarlos a almacenamiento interino en seco. Uno de los puntos más relevantes para diseñar dicho proceso es caracterizar el hidróxido formado, especialmente su contenido de agua y la disponibilidad de la misma.

Con el objeto de estudiar los óxidos generados en la aleación en agua a largo plazo, se realizaron ensayos de inmersión de probetas de AA6061 en dos medios: agua desmineralizada de alta pureza ($\rho=18 \text{ M}\Omega\cdot\text{cm}$) y solución de NaCl 10^{-3} M ($\rho=8 \text{ k}\Omega\cdot\text{cm}$) a temperatura ambiente. Los hidróxidos crecidos en solución de cloruro se estudian debido a que ésta simula un posible evento de contaminación en el agua de almacenamiento. Para cada medio se realizaron tres ensayos independientes para 6, 12 y 18 meses.

Al finalizar los ensayos, en todas las probetas se realizó la caracterización del hidróxido mediante Difracción de Rayos X. Los difractogramas correspondientes a las probetas ensayadas en agua se muestran en la Figura 1a. Para todos los tiempos de inmersión y para ambos medios, se identificó la fase del hidróxido bayerita: $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3\cdot 3\text{H}_2\text{O}$, la cual es consistente con el medio y la temperatura a la cual se desarrolló [1]. Además, se midió el espesor de los óxidos por la técnica de corrientes inducidas, y luego se realizaron cortes y se incluyeron en resina epoxi para la observación del perfil de los hidróxidos por Microscopia Electrónica de Barrido. En la Figura 1b se observa el perfil del hidróxido crecido luego de 6 meses de inmersión en agua.

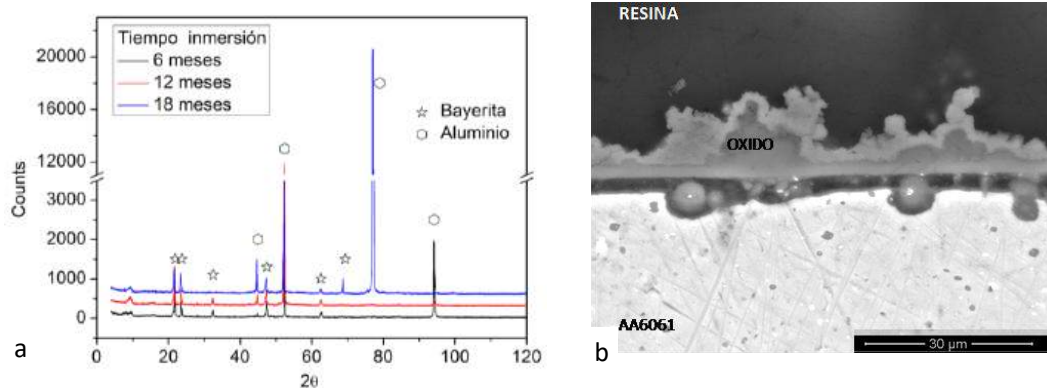


Figura 1: a) Difractogramas de los hidróxidos crecidos en agua de alta pureza; b) corte transversal del hidróxido obtenido en agua a 6 meses.

A fin de continuar con el estudio de los hidróxidos, todas las probetas se conservaron en atmósfera seca. Según la bibliografía, la bayerita puede transformar a una variedad más estable denominada gibbsita: $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ [2]. Por otra parte, existe una variedad del hidróxido con menor grado de hidratación denominado boehmita: $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3\cdot \text{H}_2\text{O}$ [1]. A continuación, en este trabajo se evaluará en el tiempo la evolución microestructural de los hidróxidos que podría ocurrir por el envejecimiento y/o la deshidratación.

[1] K. Wefers, C. Misra, Oxides and Hydroxides of Aluminum, ALCOA Tech. Pap. 19 (1987) 100.

[2] E. Deltombe, C. Vanleughenaghe, M. Pourbaix, Aluminium, in: M. Pourbaix (Ed.), Atlas Electrochem. Equilibria En Aqueous Solut., Pergamon Press, London, 1974.



MEDICIÓN DE TENSIONES RESIDUALES EN PROBETAS DE ACERO 304L Y ZIRCALOY-4 MECANIZADAS POR EDM Y POR AWJM

N. Iriberry^{a,b*}, G. Abate^c, D.F. Lionello^d, C.L.K. Varela^b, D.M. Krähmer^{a,c}, S.F. Aricó^b, D.R. Vega^d

^a Ingeniería Metalúrgica, UNAHUR, Instituto de Tecnología e Ingeniería, Buenos Aires, Argentina

^b Gerencia Materiales, Gerencia de Área Energía Nuclear, CNEA, Buenos Aires, Argentina

^c Centro de Investigación y Desarrollo en Mecánica, INTI, Buenos Aires, Argentina

^d Gerencia Investigación y aplicaciones, GAIDI, CNEA, Buenos Aires, Argentina.

*nicolasiriberri@cnea.gob.ar

Palabras claves: TENSIONES RESIDUALES; DIFRACCIÓN DE RAYOS X; PROBETAS MINIATURIZADAS; EDM; AWJM

En el ámbito de las técnicas de maquinado de probetas para ensayos de tracción existen dos de particular interés por su baja pérdida de material en comparación con el corte mecánico. Las mismas son: mecanizado por descarga eléctrica (EDM, Electrical Discharge Machining) y corte por chorro de agua con abrasivo (AWJM, Abrasive Water Jet Machining). El presente trabajo tiene como objetivo comparar la influencia de estas técnicas sobre el estado microestructural, las tensiones residuales y las propiedades mecánicas de probetas miniaturizadas. Para ello, se mecanizaron probetas tipo I, conforme a la norma ASTM E8-24 [1], a partir de acero inoxidable AISI 304L y Zircaloy-4 (Zry-4), dos materiales de amplia aplicación en componentes estructurales de la industria nuclear.

La caracterización de las tensiones residuales de las muestras de A-304L y Zry-4 se realizó mediante difracción de rayos X (DRX) variando el ángulo Ψ que indica la inclinación de la muestra con respecto a la fuente y al detector. Se realizaron mediciones de las tensiones residuales en el estado inicial (IS) como después de la aplicación de los procesos de mecanizado. En ambos materiales se seleccionó un pico característico dentro de un rango angular específico para llevar a cabo el análisis de tensiones residuales (Figura 1).

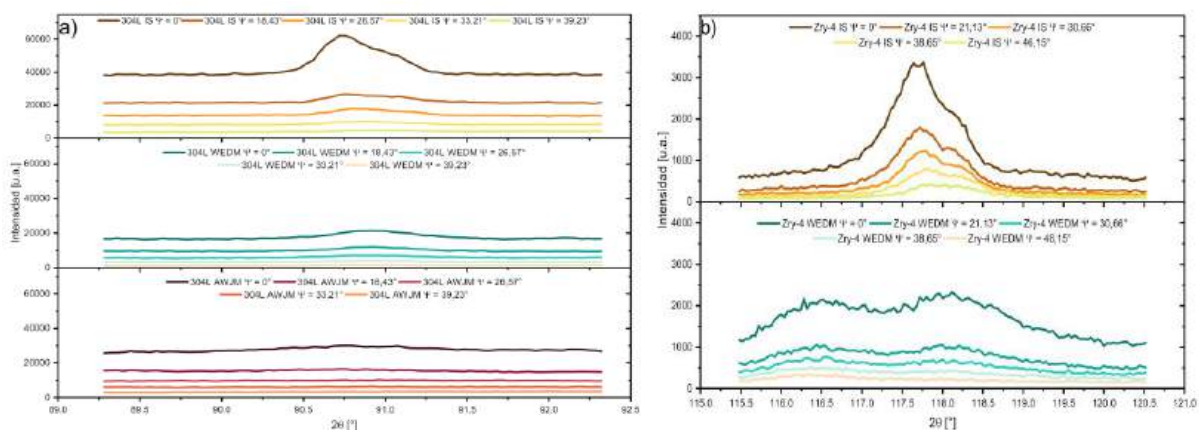


Figura 1. Difractogramas de las muestras IS de (a) A-304L y (b) Zry-4.

Como resultado de estos análisis se observó que ambos materiales presentan tensiones residuales de compresión en estado inicial, las cuales están estrechamente relacionadas con los respectivos procesos de fabricación. Asimismo, se realizaron ensayos preliminares en las probetas de tracción maquinadas mediante EDM y en ambos casos se observaron tensiones de tracción menores en valor absoluto a las del material IS. Este tipo de tensiones no es deseable desde el punto de vista mecánico, dado que puede favorecer la propagación de fisuras. En el caso del Zry-4, los difractogramas mostraron, en los valores angulares altos, la aparición de un doble pico de difracción, en comparación con el estado inicial. Este comportamiento coincide con lo reportado por Suárez et al. [2].

[1] ASTM International. Standard test methods for tension testing of metallic materials (ASTM E8/E8M-24) (2024).

[2] A. Suárez, F. Veiga, R. Polvorosa, T. Artaza, J. Holmberg, L.N López de Lacalle, A. Wretland, J. Manuf. Process. 48 (2019) 44–50.



PELÍCULAS CATALÍTICAS DE Fe_xO_y CRECIDAS SOBRE LANA DE HIERRO: INFLUENCIA DE LA GEOMETRÍA Y DIMENSIÓN DEL SUSTRATO

Mayra A. Franco^{1*}, Flavia Durán², María Alicia Ulla¹, Juan Manuel Zamaro¹

¹ Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), UNL, FIQ, Santiago del Estero 2829, 3000, Santa Fe, Argentina.

² Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI), UNSL, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia. Almirante Brown 1455, 5700 San Luis, Argentina.

*mafrancomurcia@fiq.unl.edu.ar

Palabras claves: NANO-ÓXIDOS; HEMATITA; MAGNETITA; CRECIMIENTO IN SITU; PELÍCULA

Se ha visto que películas de nano-óxidos obtenidas por crecimiento in-situ sobre distintos sustratos metálicos han logrado un buen desempeño como micro-reactores en la reacción de oxidación de CO [1-3]. En trabajos previos, se estudió el efecto de la temperatura (300-600 °C) y del tiempo de tratamiento (1-240 min a 600 °C) en el crecimiento de capas de Fe_xO_y sobre sustratos de lana de hierro comercial. La película obtenida a 600 °C por 1 min resultó de interés debido a su destacado desempeño catalítico en la oxidación de CO. En el presente trabajo se comparan las propiedades y desempeño de películas nanoestructuradas de Fe_xO_y obtenidas sobre lana de hierro comercial de diferentes grosor y geometría de hebras (33 μm y 46 μm). Esta diferencia en la geometría y dimensiones del sustrato podría estar relacionado con el desarrollo de la capa de óxido y su posterior comportamiento catalítico.

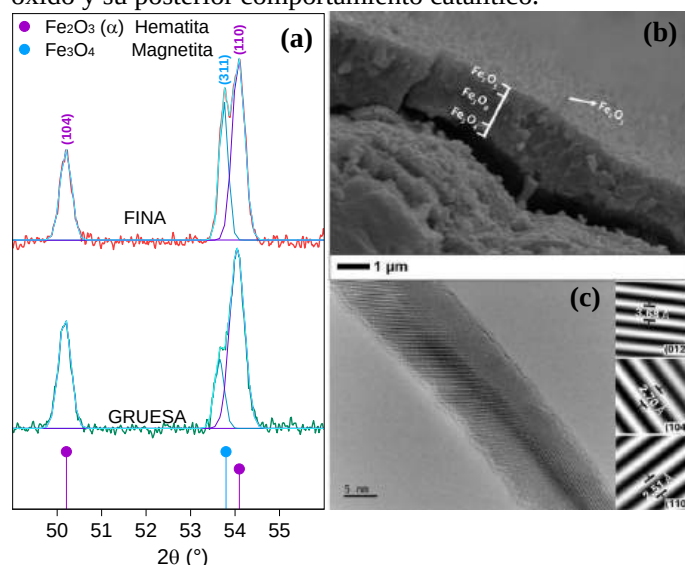


Figura 1. **a)** XRD películas Fe_xO_y 600°C 1min (fina y gruesa); **b)** Imagen SEM película gruesa; **c)** Imagen TEM agujas de hematita película fina.

Por XRD (Fig.1a) se confirmó que a nivel bulk las películas se conformaron principalmente de Hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) y Magnetita (Fe_3O_4). No obstante, la película de hebra fina presentó una mayor proporción de magnetita, evidenciada por una mayor intensidad de la señal del plano (311) (Fig. 1a). Además, se confirmó un crecimiento preferencial del plano (110) de la hematita en ambas películas, en comparación con los patrones de Fe_2O_3 en polvo. Las imágenes SEM (Fig. 1b), revelaron tres regiones dentro de la capa porosa: una delgada y granular en la interfase con el sustrato y otra más gruesa, estructura columnar por sobre ésta, ambas asociadas a magnetita. En la superficie se desarrolló una capa delgada ($\sim 0.3 \mu\text{m}$) correspondiente a hematita, sobre la que crecieron estructuras en forma de agujas delgadas. Dichas agujas fueron caracterizadas por HRTEM (Fig. 1c), confirmando que

corresponden a hematita, evidenciándose los planos cristalinos (012), (110) y (104).

La película de óxidos de Fe_xO_y soportada en hebras finas mostró un excelente desempeño catalítico en la oxidación de CO, con una notable estabilidad tanto en el tiempo como en ciclos de ensayo consecutivos. El crecimiento con alta orientación del plano (110) de la hematita y el desarrollo de agujas superficiales expuestas podría estar relacionado con su destacado desempeño. Estos resultados destacan el potencial de este sistema como plataforma para el desarrollo de micro-reactores de bajo costo y obtenidos a través de un método simple.

[1] A.P. Cabello, M.A. Ulla, J.M. Zamaro; Top. Catal. 62 (2019) 931.

[2] A.P. Cabello, M.A. Ulla, J.M. Zamaro; J. Mater. Sci. 57 (2022) 12797.

[3] A.P. Cabello, M.A. Franco, M.A. Ulla, J.M. Zamaro; Catalysts 13 (2023) 932.

Índice de Autores

Abratti Bogdanich, Valentina (CM63), [100](#)

Abratti Bogdanich, Valentina (CM64), [101](#)

Adarvez Feresin, Camila (CM65), [102](#)

Adarvez Feresin, Camila (CM66), [103](#)

Alzari, Pedro (P3), [13](#)

Aristarán, Luisina (TO1), [112](#)

Barbosa, Lucia (CM1), [38](#)

Barrios, Oriana (CM2), [39](#)

Bernini, Celeste (CM47), [84](#)

Bernini, Celeste (SP2), [20](#)

Bianchi, Ana (CM3), [40](#)

Calvo, Natalia (CM48), [85](#)

Camargo, Javier (CM4), [41](#)

Chiarlamonte, Natalia (CM5), [42](#)

Chiarlamonte, Natalia (TO2), [113](#)

Comedi, David (SP8), [26](#)

Conconi, Susana (CM6), [43](#)

Conconi, Susana (CM7), [44](#)

Corvalan, Carolina (CM8), [45](#)

Corvalan, Carolina (TO4), [115](#)

Cukiernik, Fabio (CM49), [86](#)

De Los Hoyos, Camilo (CI1), [108](#)

Di Salvo, Florencia (CI3), [110](#)

Diaz, Jorge (CM50), [87](#)

Escudero, Dahiana (CM51), [88](#)

Ferroni, Felix (CO7), [34](#)

Franco, Diego (CM9), [46](#)

Franco, Diego (CO6), [33](#)

Franco, Mayra (TO6), [117](#)

Franco, Vanina (CM10), [47](#)

Franco, Vanina (CO3), [30](#)

Fuentes, Matias (CM11), [48](#)

Fuentes, Matias (CM12), [49](#)

Fuertes, Valeria (CM52), [89](#)

Fuertes, Valeria (CO4), [31](#)

Gallinares, Agustina (CM13), [50](#)

Gauna, Matias (CM14), [51](#)

Gaztanaga, Pablo (CO8), [35](#)

Godoy, Agustín (CI2), [109](#)

Gomez, Arturo (CM67), [104](#)

Gomez, German (CM53), [90](#)

Gomez, Ornella (CM15), [52](#)

Gomez, Ornella (CM16), [53](#)

González, Javier (SP7), [25](#)

Guerrero, Lina (CM17), [54](#)

Gutiérrez, Eduardo (CM54), [91](#)

Gutiérrez, Eduardo (CO2), [29](#)

Harrison, Laura (CM55), [92](#)

Hupp, Joseph (P7), [17](#)

Iriberri, Nicolas (TO5), [116](#)

Iturriaga, Celina (CM56), [93](#)

Kurtz, Alexander (CM57), [94](#)

López, Carlos (CM21), [58](#)

Lamas, Diego (CM18), [55](#)

Lamas, Diego (CM19), [56](#)

Lamas, Diego (P2), [12](#)

Lizarraga, Diego (CM20), [57](#)

Llarrull, Leticia (SP6), [24](#)

Magalhaes, Gabriel (CM22), [59](#)

Magalhaes, Gabriel (CM23), [60](#)

Martin, Gabriel (CM24), [61](#)

Martin, Gabriel (CM25), [62](#)

Martinez, Rosmaira (CM58), [95](#)

Mateos, Ailín (CM26), [63](#)

Matilla, Lucas (CM27), [64](#)

Menger, Lucas (CM28), [65](#)

Orozco, María José (CM29), [66](#)

- Orozco, María José (TO3), 114
 Orso, José (CO5), 32
 Otero, Manuel (CM30), 67
 Oyarzábal, Julio (CM31), 68
 Oyarzábal, Julio (CO9), 36
- Palanca, Ignacio (CM68), 105
 Parra, Rodrigo (SP4), 22
 Pellegrini, Nora (SP3), 21
 Ponce, Vanesa (CM32), 69
- Quiroga Valenzuela, Cynthia (CM33), 70
- Rafti, Matias (SP1), 19
 Raimundi, Valentina (CM34), 71
 Resentera, Alexander (CM35), 72
 Reviglio, Lucia (CM36), 73
 Rey, Juan Manuel (CO1), 28
 Rivas Rojas, Patricia (CM37), 74
 Rodriguez, Maricel (CM38), 75
- Rodriguez, Maricel (CM39), 76
 Rustan, Marcelo (CM59), 96
- Saleta, Martin (CM40), 77
 Saleta, Martin (CM41), 78
 Saleta, Martin (SP5), 23
 Sandobal, Jorge (CM60), 97
 Santarelli, Andres (CM61), 98
 Serquis, Adriana (P4), 14
- Tagua, Débora (CM42), 79
 Terny, Soledad (CM43), 80
 Tobia, Dina (CM44), 81
 Toudic, Bertrand (P5), 15
- Vivas, Manuel (CM45), 82
- Zamaro, Juan (CM62), 99
 Zamaro, Juan (P1), 11
 Zelaya, Eugenia (CM46), 83
 Zelaya, Eugenia (P6), 16