

INFORME CIENTIFICO DE BECA

Legajo N°:

BECA DE Entrenamiento**PERIODO 2016**1. **APELLIDO:** Panzini**NOMBRES:** Mercedes**Dirección Particular:** Calle:**Localidad:** Bahía Blanca **CP:** 8000 **Tel:****Dirección electrónica (donde desea recibir información):** mechi.panzini@gmail.com**2. TEMA DE INVESTIGACIÓN** (Debe adjuntarse copia del plan de actividades presentado con la solicitud de Beca)**Catalisis Computacional: el caso de defectos puntuales en antimonio de vanadio (110):**

Las reacciones de oxidación catalítica de hidrocarburos han sido extensamente estudiadas (Bielanski y Haber, 1991) debido a su gran importancia para el desarrollo de la industria química. La oxidación catalítica es la base de la producción de monómeros usados en la manufactura de fibras sintéticas, plásticos y en la síntesis de intermediarios aplicados en química fina. El incremento del costo de energía y la menor disponibilidad de hidrocarburos baratos ha constituido la fuerza impulsora para el estudio de nuevos procesos de oxidación selectiva tendientes a lograr mayor selectividad y menor consumo de energía. La selectividad es un factor clave en los procesos de oxidación selectiva ya que los productos de oxidación total están termodinámicamente favorecidos. El V_2O_5 modificado por reacción con Sb_2O_3 da lugar a la formación de una fase tipo rutilo de $VSbO_4$. La adición produce cambios electrónicos y estructurales. En la literatura abierta se destaca el comportamiento catalítico del antimonato de vanadio en la amoxidación de propileno y de tolueno (Chiang y Lee, 1997). A pesar del tiempo transcurrido, existe actualmente incertidumbre acerca de los factores que afectan la selectividad y del rol de los distintos cationes en el mecanismo de reacción. Los resultados experimentales no son concluyentes y es por eso que la simulación de estructuras $VSbO_4$ con vacancias puede ser un camino para interpretar datos y predecir comportamientos catalíticos. Se propone la construcción de una celda unidad trirutilo para el $VSbO_4$ y un "slab" de varias capas exponiendo la cara (110). Se simularán las propiedades del sólido másico y de la superficie mediante cálculos ab initio a nivel del funcional de la densidad (DFT), metodología ampliamente difundida para la simulación en catalisis y ciencia de materiales. Se empleará el paquete VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package) que dispone bajo licencia el grupo dirigido por la Dra. Brizuela. Este paquete utiliza pseudopotenciales o métodos de LAPW y ondas planas como bases y desarrolla simulaciones de dinámica molecular (MD), cuanto-mecánicas a nivel ab-initio. Se empleará el método PAW para la totalidad de electrones de Bloch y para el intercambio y correlación electrónica la aproximación GGA. Para el muestreo del espacio k se utilizará el esquema de Monkhorst-Pack. VASP permite la optimización geométrica total y la minimización de energías en diferentes combinaciones de vacancias catiónicas. Así es posible, en principio plantear un número razonable de combinaciones espaciales para la distribución de vacancias y mediante cálculo lograr predecir cuál de ellas minimiza la energía del sistema. Una vez determinada la estructura más estable en el "slab" se calcularán las cuplas $V+3V+4$ mediante el método de cargas de Bader. Se intentará correlacionar las cuplas con la actividad catalítica reportada en la literatura y con datos de caracterización de rayos X y

espectroscopía fotoelectrónica XPS disponibles por colaboración con el grupo experimental del Prof. M. Bañares de España.

BIBLIOGRAFIA

- Bielanski A., J. Haber, 1991. Oxygen in Catalysis, Merce Dekker, Inc, N.Y.
- Chiang H., Min Dar Lee, 1997. Characterizations and catalytic behaviours of vanadium-antimony oxide catalysts in propane ammoxidation, Applied Catalysis A: General 154, 55-74.
- G. Kresse, J. Furthmüller; <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html>

3. OTROS DATOS (Completar lo que corresponda)

BECA DE ESTUDIO: 1º AÑO: *Fecha de iniciación:*

2º AÑO: *Fecha de iniciación:*

BECA DE PERFECCIONAMIENTO: 1º AÑO: *Fecha de iniciación:*

2º AÑO: *Fecha de iniciación:*

4. INSTITUCIÓN DONDE DESARROLLA LOS TRABAJOS

Universidad y/o Centro: Del Sur

Facultad:

Departamento: Física

Cátedra: Física General

Otros:

Dirección: Calle: Av. Alem Nº: 1253

Localidad: Bahía Blanca *CP:* 8000 *Tel:* 0291-4595142

5. DIRECTOR DE BECA

Apellido y Nombres: Brizuela, Graciela

Dirección Particular: Calle:

Localidad: Bahía Blanca *CP:* 8000

Dirección electrónica: gbrizuela@uns.edu.ar

6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO. (Debe exponerse la orientación impuesta a los trabajos, técnicas empleadas, métodos, etc., y dificultades encontradas en el desarrollo de los mismos, en el plano científico y material).

Durante el período de la beca en una primera etapa estudie la cristalografía de la estructura rutilo ya que el VSbO₄ presenta una estructura tri-rutilo. Mediante el programa CRYSTMALMAKER realice cortes de planos y analice la distribución de oxígenos y de cationes en el plano (110). Para esto debí intruducirme en conceptos básicos de la Física y Química de los Sólidos que no habia visto en mi carrera. Una vez definido el plano a estudiar debí entrenarme en el uso del programa VASP de calculo de Funcional de la Densidad con ondas planas. Para ello me introduje en la Física del Sólido y la estructura electrónica en sistemas periódicos estudiando conceptos como espacio recíproco, estructura de bandas, zonas de Brillouin y densidad de estados. En una primera etapa reproducimos la estructura de bandas del rutilo y la densidad de

estados proyectados en oxígeno y cationes. En este punto desarrollé cálculos en estructuras 3D periódicas y en "slabs" de siete capas representando el VSbO₄ con vacancias. Por otra parte calculamos la distribución de cargas electrónicas y las cuplas $V+3/V+4$. Dado los tiempos de cálculo no se ha podido avanzar en la adsorción de tolueno sobre estos slabs y se espera continuar en lo que resta del año ya como tema vocacional a fin de poder presentar un trabajo a congreso de Físicoquímica previsto para 2017. Como dificultad encontrada puedo indicar que la mayoría de los conceptos de estructura cristalina y Física del Sólido los debí aprender con anterioridad a iniciar los cálculos lo que llevó a tener que disponer de mayor tiempo para lograr concretar los primeros resultados de estructura electrónica.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN REALIZADOS O PUBLICADOS EN EL PERIODO.

7.1. PUBLICACIONES. Debe hacerse referencia, exclusivamente a aquellas publicaciones en la cual se halla hecho explícita mención de su calidad de Becario de la CIC. (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha aclaración no debe ser adjuntada. Indicar el nombre de los autores de cada trabajo, en el mismo orden que aparecen en la publicación, informe o memoria técnica, donde fue publicado, volumen, página y año si corresponde; asignándole a cada uno un número. En cada trabajo que el investigador presente -si lo considerase de importancia- agregará una nota justificando el mismo y su grado de participación.

No corresponde.

7.2. PUBLICACIONES EN PRENSA. (Aceptados para su publicación. Acompañar copia de cada uno de los trabajos y comprobante de aceptación, indicando lugar a que ha sido remitido. Ver punto 7.1.)

7.3. PUBLICACIONES ENVIADAS Y AUN NO ACEPTADAS PARA SU PUBLICACIÓN.
(Adjuntar copia de cada uno de los trabajos. Ver punto 7.1.)

No corresponde

7.4. PUBLICACIONES TERMINADAS Y AUN NO ENVIADAS PARA SU PUBLICACIÓN.
(Adjuntar resúmenes de no más de 200 palabras)

7.5. COMUNICACIONES. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores)

7.6. TRABAJOS EN REALIZACIÓN. (Indicar en forma breve el estado en que se encuentran)
Se está realizando un trabajo sobre adsorción de tolueno sobre VSbO₄ con vacancias, se espera presentarlo en el congreso argentino de físicoquímica de 2017.

8. OTROS TRABAJOS REALIZADOS. (Publicaciones de divulgación, textos, etc.)

8.1. DOCENCIA

No corresponde

8.2. DIVULGACIÓN

No corresponde

8.3. OTROS

No corresponde

9. ASISTENCIA A REUNIONES CIENTÍFICAS. (Se indicará la denominación, lugar y fecha de realización y títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas)

No corresponde

10. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC. (Señalar características del curso o motivo del viaje, duración, instituciones visitadas y si se realizó algún entrenamiento)

No corresponde

11. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO

No corresponde

12. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO

No corresponde

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

Al momento de solicitar la beca contaba con el 67% de la carrera aprobada y actualmente 84,85%. Además he mejorado mi promedio a 7.18/10.

Durante el periodo de realización de la Beca de Entrenamiento CIC aprobé las siguientes asignaturas:

- Equipos para procesos.
- Contaminación del aire y control de emisiones.
- Ámbitos de desempeño profesional, temáticas y herramientas útiles.
- Ingeniería electroquímica y corrosión.

Como actividad de extensión realicé clases de apoyo escolar en el Hogar Mamá Margarita. para niños en situación de riesgo dentro de un programa de voluntariado de la UNS.

14. TITULO DEL PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PERIODO DE PRORROGA O DE CAMBIO DE CATEGORÍA (Deberá indicarse claramente las acciones a desarrollar)

No corresponde

Condiciones de Presentación

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

- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 14).
- b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, deben agregarse al término del desarrollo del informe
- c. Informe del Director de tareas con la opinión del desarrollo del becario (en sobre cerrado).

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