

CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

Informe Científico¹

PERIODO ²: 2015-2016

1. DATOS PERSONALES

APELLIDO: VICENTE

NOMBRES: JOSE LUIS

Dirección Particular: Calle: Localidad: LA

PLATA CP: 1900

Dirección electrónica (donde desea recibir información, que no sea "Hotmail"):

vicente@inifta.unlp.edu.ar

2. TEMA DE INVESTIGACION

DESARROLLO DE MODELOS TEORICOS DE INTERES FISICOQUIMICO

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

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

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

- a) Adsorción de contaminantes líquidos. (Interfases sólido–solución)
- b) Adsorción de gases. (Interfases sólido – gas)
- c) Catálisis y cinética en superficies (Interfaces alejadas del equilibrio)

PALABRAS CLAVE (HASTA 3) adsorción fisicoquímica modelos

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

INGRESO: Categoría: Asistente Fecha: Agosto 1987

ACTUAL: Categoría: Principal desde fecha: Noviembre 2009

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

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

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

² El informe deberá referenciar a años calendarios completos. Ej.: en el año 2017 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2015 al 31-12-2016, para las presentaciones bianuales. Para las presentaciones anuales será el año calendario anterior.

Facultad: Ciencias Exactas

Departamento: Química

Cátedra:

Otros:

Dirección: Calle: 64 y diag. 113 N°:

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

Cargo que ocupa: Director de un grupo de investigación

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

Apellido y Nombres:

Dirección Particular: Calle: N°:

Localidad: CP: Tel:

Dirección electrónica:

.....
Firma del Director (si corresponde)

.....
Firma del Investigador

6. RESUMEN DE LA LABOR QUE DESARROLLA

Descripción para el repositorio institucional. Máximo 150 palabras.

Estudio de procesos de adsorción fisicoquímica sobre superficies heterogéneas. De acuerdo al tipo proceso/interfase las tareas se dividen en: a) adsorción sólido – solución acuosa, b) adsorción en sólido – gas, c) fenómenos lejos del equilibrio en nuevos materiales. Desde soluciones acuosas se estudia la adsorción de compuestos orgánicos sobre carbones activados, zeolitas, etc., para aplicarlo tanto a la recuperación de suelos degradados por la agricultura como al tratamiento de efluentes industriales mediante purificación por adsorción. En la segunda línea se determina comportamiento de la fase adsorbida en relación con las características superficiales para distintos materiales. Esto se vincula al desarrollo de nuevas tecnologías tanto para almacenar gas natural a "bajas" presiones, como para separar mezclas de gases. En la tercera línea se caracterizan distintos mecanismos que pueden modificar la estructura y propiedades de nuevos materiales (nanotubos de carbón, MOFs, catalizadores, etc.), cuando los mismos se producen en condiciones alejadas del equilibrio.

7. EXPOSICION SINTETICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO.

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

La síntesis en las tres áreas de interés tecnológico es:

a) Adsorción de contaminantes líquidos – (Interfases sólido – solución)

Dentro de los estudios de interfases sólido-solución resulta de gran interés aquellas que involucran la adsorción física y/o química de distintos plaguicidas y sus derivados. En esta área se presentó en 2013 una Tesis Doctoral en la UNL [1] sobre la adsorción de compuestos biorrefractarios. La experiencia adquirida ha permitido formar, a partir de 2015, un proyecto interdisciplinario con integrantes de INTA, Estación Experimental Agropecuaria INTA Pergamino del grupo Dr. A.E. Andriulo, para estudiar fenómenos de pirólisis que transformen recursos biomásicos en compuesto de interés para la producción agropecuaria, a fin de aplicarlo al suelo como enmienda en forma controlada y apuntando a mejorar su calidad. Las materias primas provienen de la poda de invierno

de árboles caducifolios de distintos municipios, de cama de pollo derivados de industrialización avícola, y de cultivos bioenergéticos, dada su elevada producción y capacidad para captar carbono. Nuestro grupo caracteriza los atributos fisicoquímicos asociados a propiedades agronómicas y ambientales. Apuntamos a evaluar la potencialidad de los productos en la recuperación de la fertilidad, y retención de nutrientes y plaguicidas, en suelos degradados por la agricultura. Esta propuesta se realiza en la región bonaerense y cuenta, en parte, con financiamiento de FONCyT[2].

b) Adsorción de gases – (Interfases sólido – gas)

Una de las formas de describir las interfases gas –sólido, es a través de la adsorción desde distintos sólidos porosos. En esta área se presentó en 2011 una Tesis Doctoral [3] que estudiaba diferentes estructuras carbonosas y su capacidad para adsorber gases de importancia energética y tecnológica (CH₄-CO₂). Esta tarea ha continuado con el análisis teórico y experimental [4,5], de separación de mezclas de gases sobre estructuras de carbon.

c) Catálisis y cinética en nuevos materiales – (Interfases lejos del equilibrio).

Dentro del trabajo de Tesis Doctoral del Dr. M.Rafti [6], se estudiaron superficies de Pt(100) vinculadas a la cinética de las reacciones de NH₃+O₂ y NH₃+NO. Actualmente se analizan, desarrollan y sintetizan distintas nanoestructuras que muestran comportamientos fisicoquímicos singulares (adsorción - reacción) sobre sus superficies [7].

REFERENCIAS

- [1] “Estudio de la adsorción de compuestos biorrefractarios sobre soluciones acuosas”
P.Húmpola, Tesis Doctoral (2013)
Universidad Nacional del Litoral. Calificación: Sobresaliente (10)
- [2] Resolución No 240/16 FONCyT PICT 2015 Plan Argentina Innovadora 2020
TITULO: "Pirolisis lenta para la transformación de recursos biomásicos en compuestos de interés para la producción agropecuaria."
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Vicente, José Luis
AREA TEMATICA: Tecnología Agraria y Forestal.
REGION: Bonaerense.
- [3] “Estudio de la adsorción de gases en nanoestructuras de carbón”
A.G. Albesa, Tesis Doctoral (2011)
Universidad Nacional de La Plata. Calificación: Sobresaliente (10)
- [4] “Estudio de la adsorción de gases sobre superficies carbonosas mediante simulaciones Montecarlo”
M.F. Araya; A.G. Albesa; J.L. Vicente
100 Reunión Nacional Asociación Física Argentina. 22-25/09/2015. Merlo. San Luis.
- [5] "Low-pressure equilibrium binary argon-methane gas mixture adsorption on exfoliated graphite: Experiments and simulations".
A.Albesa, B. Russell, J.L. Vicente y M. Rafti
Chemical Physics Letters 650, 130-137 (2016).
- [6] "Estudio de estructuras disipativas en catálisis heterogénea"
M.Rafti, Tesis Doctoral (2007).
Universidad Nacional de La Plata. Calificación: Sobresaliente (10)
- [7] "Description of chemically and thermally treated Multi-walled Carbon Nanotubes using sequential decomposition of adsorption isotherms".
A.G. Albesa; M. Rafti y J.L. Vicente
Surface Review and Letters 23, 1650025-1650033 (2016).

8. TRABAJOS DE INVESTIGACION REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERIODO.

8.1 PUBLICACIONES. *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellas publicaciones en las que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha mención no debe ser adjuntada porque no será tomada en consideración. A cada publicación, asignarle un número e indicar el*

nombre de los autores en el mismo orden que figuran en ella, lugar donde fue publicada, volumen, página y año. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparece en la publicación. La copia en papel de cada publicación se presentará por separado. Para cada publicación, el investigador deberá, además, aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del trabajo y, para aquellas en las que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación. Asimismo, para cada publicación deberá indicar si se encuentra depositada en el repositorio institucional CIC-Digital.

[1] "Description of chemically and thermally treated Multi-walled Carbon Nanotubes[^] using sequential decomposition of adsorption isotherms".

A.G. Albesa; M. Rafti y J.L. Vicente

Surface Review and Letters 23, 1650025-1650033 (2016).

Código ISSN: 0218-625X

Abstract

The effect of wet oxidation by means of sulfuric/nitric acid mixtures, and high-temperature treatment of commercial arc-discharge synthesized multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) was studied. In order to analyze the adsorption capacities of differently treated MWCNTs, we employed a multistep method that considers separately different pressure ranges (zones) on the experimentally obtained isotherms. The method is based on simple gas isotherm measurements (N₂, CO₂, CH₄, etc.). Low pressure ranges can be described using Dubinin's model, while high pressure regimes can be fitted using different models such as BET multilayer and Freundlich equations. This analysis allows elucidate how different substrate treatments (chemical and thermal) can affect the adsorbate-adsorbent interactions; moreover, theoretical description of adsorbate-adsorbate interaction can be improved if a combination of adsorption mechanisms are used instead of a unique model. The results hereby presented also show that, while MWCNTs are a promising material for storage applications, gas separation applications should carefully consider the effect of wide nanotube size distribution present on samples after activation procedures.

[2] "Low-pressure equilibrium binary argon-methane gas mixture adsorption on exfoliated graphite: Experiments and simulations".

A. Albesa, B. Russell, J.L. Vicente y M. Rafti

Chemical Physics Letters 650, 130-137 (2016).

Código ISSN: 0009-2614

Abstract

Adsorption equilibrium measurements of pure methane, pure argon, and binary mixtures over exfoliated graphite were carried for different initial compositions, temperature, and total pressures in the range of 0.1 – 1.5 Torr using the volumetric static method. Diagrams for gas and adsorbed phase compositions were constructed for conditions explored, and isosteric heats of adsorption were calculated. Experimental results were compared with predictions obtained with Monte Carlo Simulations and using the Ideal Adsorbed Solution Theory (IAST).

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

los que considere que ha hecho una contribución de importancia, deber á escribir una breve justificación.

8.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION.

Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo, indicando el lugar al que han sido enviados. Adjuntar copia de los manuscritos.

8.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION.

Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo.

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

“Estudio de la adsorción de gases sobre superficies carbonosas mediante simulaciones Montecarlo”.

M.F. Araya; A.G. Albesa; J.L. Vicente

100 Reunión Nacional Asociación Física Argentina.

22/09/2015 al 25/09/2015, Villa de Merlo. San Luis.

Resumen

Durante las últimas décadas ha habido un gran desarrollo en las tecnologías de separación y purificación, utilizándose con este objetivo varias técnicas, entre ellas la adsorción. La adsorción se utiliza principalmente en la producción de hidrogeno, en la producción de oxigeno a partir de aire y de remoción a trazas de impurezas sobre gases contaminados. Se han realizados numerosos estudios de adsorción sobre nanotubos de carbono de paredes simples, debido a que poseen la capacidad de adsorber diferentes gases, gracias a que poseen la propiedad de disponer de sitios de adsorción con características unidimensionales. Como consecuencia, los nanotubos son utilizados principalmente como medio para almacenar gases de alta energía o como tamices moleculares para separar mezclas de gases. Los procesos de adsorción se pueden controlar experimentalmente o mediante programas de computadora. En el siguiente trabajo se desarrollan programas de computadora utilizándose para ello simulaciones de Montecarlo. En este trabajo, dichas simulaciones se utilizan para calcular propiedades termodinámicas macroscópicas como el calor isoterico de adsorción. Esta es una variable crítica para estimar el rendimiento de un proceso de separación de gases. Los calores pueden ser altos y una función compleja del grado de cubrimiento cuando los adsorbentes son heterogéneos. Su medida puede llevarse a cabo empleando la ecuación de Clayperon, sin embargo es poco práctico utilizarla cuando se trata de mezclas de gases, por lo que es más exacto realizar medidas calorimétricas. Los resultados obtenidos son analizados mediante modelos teóricos como los de Dual Langmuir y la Teoría de la solución ideal adsorbida.

8.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS. *Incluir un listado y acompañar copia en papel de cada uno o referencia de la labor y del lugar de consulta cuando corresponda. Indicar en cada caso si se encuentra depositado en el repositorio institucional CIC-Digital.*

9. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

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

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

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

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

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

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

El Laboratorio de Adsorción del INIFTA que dirijo ha realizado servicios a través de la autorización a prestar Servicios Tecnológicos de Alto Nivel (STAN) para el asesoramiento a empresas bajo el sistema de servicios a terceros de acuerdo a la resolución 3276 del 16-12-07 del directorio del CONICET.

Durante 2015-2016 se realizaron servicios de determinación de porosidad y área superficial específica a dos empresas de la provincia de Buenos Aires.

11. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

11.1 DOCENCIA

El Libro “Matemáticas Especiales para Físicoquímicos” ha sido seleccionado y aprobado dentro de los proyectos correspondientes a la Convocatoria Libros de Cátedra 2015 de la Editorial de la Universidad Nacional de La Plata.

11.2 DIVULGACIÓN

En cada caso indicar si se encuentran depositados en el repositorio institucional CIC-Digital.

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

INVESTIGADORES

Nombre: A.G. Albesa

Institución: CONICET, Investigador Asistente

Tema: Adsorción Física sobre estructuras de carbono.

Período: 2015-2016, Director: Dr. J.L. Vicente

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

Tesis de Doctorado

[1] Nombre: Lic. M.Rafti

Tema: Estudio de estructuras disipativas en catálisis heterogénea.

Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.

Calificación: 10 (sobresaliente). 2007.

[2] Nombre: Lic. Alberto G. Albesa

Tema: Estudio de la adsorción de gases en nanoestructuras de carbón.

Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.
Calificación: 10 (sobresaliente) 2011.

[3] Nombre: Lic. Pablo Húmpola

Tema: Estudio de adsorción de compuestos biorrefract. en soluciones acuosas

Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Bioquímica y Farmacia de la UNL.

Calificación: 10 (sobresaliente) 2013.

[4] Nombre: Msc. María C. Cordero

Tema: Características fractales en interfases eléctricas y electroquímicas.

Tarea: Dirección de Tesis, en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.

Tesis en ejecución.

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

100 Reunión Nacional Asociación Física Argentina.

22/09/2015 al 25/09/2015, Villa de Merlo. San Luis.

“Estudio de la adsorción de gases sobre superficies carbonosas mediante simulaciones Montecarlo”.

M.F. Araya; A.G. Albesa; J.L. Vicente

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

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

[1] Subsidio Institucional a Investigadores CIC

Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires

Período: a partir del 10/04/15

Monto: \$ 8000

[2] Subsidio del Proyecto de Investigación y desarrollo 11/X715

Universidad Nacional de La Plata, SCyT

Período: 2015 – 2016

Monto: \$ 12000

[2] Subsidio Institucional a Investigadores CIC

Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires

Período: a partir del 18/03/16

Monto: \$ 10000

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

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

18. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.

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

[1] Director del Proyecto “Adsorción Físicoquímica sobre superficies heterogéneas”

Institución: Universidad Nacional de La Plata

Período: 2010-2013 y 2013-2016

Lugar: Inst. de Invest. Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, INIFTA, Fac.Cs.Extas.

[2] Miembro de la Consejo Directivo

Institución: Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata

Período: 2015-2016

Lugar: Facultad de Ciencias Exactas.

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

[1] Profesor Adjunto Ordinario, Dedicación Exclusiva.

Institución: Facultad de Ciencias Exactas. UNLP.

Período: 2012-2018

Asignatura: Matemáticas Especiales, Lic.Química 8º cuatrimestre.

Demandando aproximadamente un 10% del tiempo.

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

A solicitud de las autoridades del Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), durante el año 2015 se desmontó el Laboratorio de Adsorción del INIFTA. Se procedió a cortar y desmontar los equipos de medida de adsorción de gases, construidos en vidrio pyrex, con el objeto de desocupar el laboratorio para efectuar una remodelación integral del mismo.

A partir de 2016 en dicho espacio se continuó realizando las medidas de adsorción de gases mediante un adsortómetro automático, marca Micrometrics, modelo: ASAP 2020, adquirido recientemente por las autoridades del INIFTA. En el mismo espacio también se contará próximamente con un equipo de calorimetría diferencial de barrido (DSC), marca TA Instruments, modelo TGA Q2000, además de un equipo para realizar análisis termogravimétricos (TGA), marca TA Instruments, modelo TGA Q500, lo que permitirá ampliar enormemente la capacidad de efectuar caracterizaciones de distinto tipo de muestras. Mi grupo de trabajo proseguirá sus labores en estas nuevas instalaciones del INIFTA.

El 1 de julio de 2016 inicié, ante el Instituto de Previsión Social de la Provincia de Buenos Aires, los trámites para que se otorgue mi jubilación ordinaria, y a partir de dicha fecha continúo en funciones hasta tanto se efectivice dicha jubilación.

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

Estudio de procesos de adsorción fisicoquímica sobre superficies heterogéneas.

Para el próximo período espero continuar con la descripción de interfases sólido-gas y sólido-solución a través de procesos vinculados a la adsorción física y química. El interés se enfocará en la búsqueda y caracterización de materiales útiles como fuentes alternativas, tanto para el almacenamiento de energía, como para la purificación de efluentes líquidos o gaseosos. Las descripciones se basarán en modelos teóricos de los sistemas y en simulaciones numéricas ha desarrollar en mi grupo de trabajo.

Como sustratos proyecto emplear distinto tipo de carbones activados, "biochars", nanotubos de carbón y polímeros de coordinación microporosos, o "metal organic frameworks", sobre los que se adsorberán gases como N₂, CO₂, CH₄, O₂, C₂H₄ y C₂H₆ y las mezclas CO₂ + CH₄, O₂ + N₂, y C₂H₄ + C₂H₆. Las tareas consistirán en:

1) Caracterizar los sustratos a través de la determinación de parámetros superficiales (grado de homogeneidad, energías de adsorción, etc.), en forma directa o por cálculos a partir de las isothermas de adsorción.

2) Estudiar el comportamiento de la fase adsorbida: análisis de las perturbaciones inducidas por la superficie sobre las interacciones entre las moléculas adsorbidas (entropía de la fase adsorbida, calor de adsorción, etc.).

4) Determinar coárea del adsorbato respecto a las características superficiales, temperatura y grado de cubrimiento, para analizar la naturaleza y fuerza de las interacciones entre moléculas adsorbidas y entre éstas y el sólido.

5) Efectuar simulaciones de la fase adsorbida para estudiar la influencia de las heterogeneidades superficiales sobre el adsorbato y poder desarrollar modelos que describan al adsorbato y al sólido.

6) Producir defectos superficiales por medio de tratamientos térmicos y/o químicos, en condiciones controladas, de materiales previamente caracterizados. Asimismo realizar simulaciones para reproducir estos sistemas.

7) Adsorber mezclas de gases sobre sustratos sólidos con el objetivo de compararlas a las simulaciones Montecarlo a los efectos de predecir isotermas y calores isostéricos de adsorción a partir de las obtenidas con los gases puros.

Los sustratos serán, o bien sintetizados en el INIFTA, u obtenidos por convenios de cooperación con el Departamento de Física de la Universidad de Southern Illinois, EEUU., y del Instituto Nacional del Carbón, Oviedo, España.

Aunque estas tareas pueden enmarcarse en el campo de la investigación básica, lo señalado en los puntos 7 a) y 10 muestran, en parte, la importancia que revisten dentro del ámbito de la Provincia de Buenos Aires. Por otra parte, si bien me encuentro próximo a jubilarme, he logrado consolidar un grupo de trabajo extremadamente competente, el que además cuenta con un equipamiento de última generación (ver punto 21), lo que me permite asegurar que, luego de mi retiro, esta labor podrá continuarse, sin mas dificultades que las habituales, con la impronta que desde luego decidan darle mis colegas y discípulos.

Condiciones de la presentación:

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

- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 22).
- b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, en otra carpeta o caja, en cuyo rótulo se consignará el apellido y nombres del investigador y la leyenda "Informe Científico Período".
- c. Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.

B. Envío por correo electrónico:

- a. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: ininvest@cic.gba.gob.ar (puntos 1 al 22), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
- b. En el mismo correo electrónico referido en el punto a), se deberá incluir como un segundo documento un currículum resumido (no más de dos páginas A4), consignando apellido y nombres, disciplina de investigación, trabajos publicados en el período informado (con las direcciones de Internet de las respectivas revistas) y un resumen del proyecto de investigación en no más de 250 palabras, incluyendo palabras clave.

C. Sistema SIBIPA:

- a. Se deberá petitionar el informe en la modalidad on line, desde el sitio web de la CIC, sistema SIBIPA (ver instructivo).

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