

Ciencia de Materiales

> Propiedades magnéticas de nanohilos de aleaciones metal de transición/metal noble

Se propone: • Estudiar las propiedades magnéticas de los arreglos en función de los parámetros de síntesis y la microestructura (CoAg; NiAg; FeAg) • Diseñar nanosensores electroquímicos basados en NH de estas aleaciones para cuantificar en matrices acuosas glifosato y otros herbicidas ampliamente utilizados en nuestra provincia.

>>> **Docente:** Paula Bercoff – Correo: bercoff@famaf.unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/gcm/TrabajosFinales.htm>

> Propiedades magnéticas de láminas delgadas

Se propone: • Sintetizar láminas de FePd y FeRh por electrodeposición, sobre sustratos conductores. • Medir propiedades de magnetotransporte y evaluar desempeño como sensores electroquímicos.

>>> **Docente:** Paula Bercoff – Correo: bercoff@famaf.unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/gcm/TrabajosFinales.htm>

> Preparación y caracterización de nanopartículas magnéticas con aplicaciones en remediación ambiental

Se propone: • Preparar nanopartículas de ferritas de distintas fases (espinela, hexagonal) por mecanoquímica • Estudiar las propiedades magnéticas y vincularlas con la microestructura • Evaluar aplicaciones para distintas aplicaciones (drug-delivery, adsorción contaminantes, etc.)

>>> **Docentes:** Paula Bercoff y Lisandro Venosta – Correos: bercoff@famaf.unc.edu.ar - venosta@famaf.unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/gcm/TrabajosFinales.htm>

> Compuestos intermetálicos basados en Y-Co

La creciente demanda de imanes permanentes de alto rendimiento en aplicaciones como dispositivos para la conversión de energía, o en la industria automotriz, ha impulsado la búsqueda de materiales que presenten elevados valores de anisotropía magnetocristalina (MAE), manteniendo costos razonables para su empleo a escalas industriales. El YCo₅ es un compuesto intermetálico que se ubica como sistema base ideal para el desarrollo de nuevos imanes, ya que la ausencia de elementos con electrones 4f permite conseguir una mejor interpretación sobre el rol de los metales de transición (TM) en la anisotropía del sistema. Por otra parte, estudiar efectos de dopajes sustitucionales con Sm permitiría analizar, localmente, efectos asociados al alto valor de MAE que se presenta en el SmCo₅. Para el Trabajo Especial

se propone estudiar el origen de la alta anisotropía del campo cristalino en estos compuestos intermetálicos basados en Sm-Y-Co5, en particular, analizar la optimización de MAE a partir de dopajes sustitucionales de Sm en YCo5. Las actividades a desarrollar comprenden tanto parte teórica como experimental; en una etapa inicial, se propone analizar mediante cálculos computacionales los efectos del dopaje sustitucional sobre las propiedades estructurales y magnéticas del sistema Sm-Y-Co5. Posteriormente, se propone la producción de muestras de Sm-Y-Co5 considerando diferentes concentraciones de dopajes, y su posterior caracterización estructural y magnética. El estudio teórico se desarrollará en el marco de la teoría de la funcional densidad, a partir de la cual se obtendrá la estructura electrónica, momentos magnéticos locales, y la anisotropía magneto-cristalina de cada uno de los sistemas de interés. Para el estudio experimental, la producción de las muestras se realizará empleando la técnica denominada "melt spinning", y las caracterizaciones estructurales mediante difracción de RX, de composición mediante micro-análisis EDS, y de comportamiento magnético mediante magnetómetro VSM.

>>> **Docentes:** Marcos Oliva y Carlos Zandalazini – Correos: marcos.oliva@unc.edu.ar - carlos.zandalazini@unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/~bercoff/paginaGCM/TrabajosFinales.pdf>

> **Propiedades magneto-ópticas en semiconductores**

Las impurezas y defectos puntuales tienen un rol fundamental en las propiedades físicas de los materiales nanoestructurados, por lo que resulta de gran importancia conocer su impacto sobre el desempeño final en los dispositivos desarrollados. Su estudio presenta grandes desafíos, entre las principales dificultades se pueden mencionar; el control de la producción de defectos, y su posterior identificación a fin de asociar su rol en las propiedades finales del material. Para esto último, los métodos basados en cálculos de primeros principios han surgido como una poderosa herramienta, no sólo por su carácter predictivo, sino también como complemento para la interpretación de los fenómenos observados. Para el Trabajo Especial se propone estudiar el rol de los defectos en las propiedades electrónicas y magneto-ópticas de semiconductores. En particular, el estudio estará focalizado en materiales con aplicaciones en el campo de las energías sustentables y el tratamiento de residuos industriales, a fin de contribuir a mejorar su desempeño en el desarrollo de dispositivos nanoestructurados. Las actividades a desarrollar comprenden; (i) estudiar las propiedades ópticas para diferentes porcentajes de dopajes catiónicos en SnS/ZnS, y analizar la eventual formación de momento magnético, (ii) analizar orden magnético preferencial, la interacción de intercambio y los portadores de carga intervinientes. Los cálculos de estructura electrónica, propiedades ópticas y magnéticas, se realizarán en el marco de la teoría de la funcional densidad. Como perspectivas, los resultados teóricos obtenidos serán complementarios a estudios experimentales a desarrollar en el grupo.

>>> **Docente:** Carlos Zandalazini - Correo: carlos.zandalazini@unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/~bercoff/paginaGCM/TrabajosFinales.pdf>

> **Propiedades termoeléctricas en sulfuro de Sn.**

En la problemática energética global, uno de los factores de relevancia es el porcentaje de la energía suministrada para el funcionamiento de los dispositivos tecnológicos que se pierde por calor residual. Por una parte, se busca reducir este porcentaje de pérdida a partir de mejorar la eficiencia de funcionamiento de los dispositivos (es decir, mediante nuevos diseños y/o materiales que lo componen), y por otra parte, es de interés aprovechar esta energía térmica perdida a partir de otros dispositivos vinculados. Es en este sentido que los materiales termoeléctricos (TE) ofrecen la posibilidad de recuperar parte de esa energía térmica perdida a partir de su conversión en energía eléctrica, sin un costo ambiental agregado, ya que durante su operación no hay emisión de gases, y tampoco poseen partes móviles. Generadores TE que provechan el calor residual de tubos de escapes en automóviles, de paneles solares, y hasta el calor corporal, son algunas de sus aplicaciones ya implementadas. Actualmente, se busca mejorar la eficiencia de conversión en tales dispositivos TE, ampliando además su rango de temperatura operativa, pero sin la necesidad de incorporar elementos contaminantes en su construcción. Es en este contexto que los semiconductores de calcogenuros se presentan como

materiales promisorios para el desarrollo de los dispositivos TE de nueva generación. Para el Trabajo Especial se propone realizar un estudio del rendimiento termoeléctrico en el sulfuro de estaño (SnS) empleando métodos computacionales. Las actividades a desarrollar involucran; (i) analizar los efectos de la distorsión de red y de las diferentes simetrías cristalinas del sistema SnS, (ii) evaluar las condiciones necesarias para ampliar el rango de temperaturas de operación en el SnS, teniendo como eje la optimización de los parámetros de transporte eléctrico y térmico. Los cálculos de estructura electrónica se realizarán en el marco de la teoría de la funcional densidad, empleando además la teoría de transporte de Boltzmann para determinar las propiedades termoeléctricas de interés. Como perspectivas, los resultados teóricos obtenidos serán complementarios a estudios experimentales a desarrollar en el grupo.

>>> **Docente:** Carlos Zandalazini - Correo: carlos.zandalazini@unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/~bercoff/paginaGCM/TrabajosFinales.pdf>

>Simulaciones micromagnéticas de nanoestructuras de interés tecnológico

La propuesta general consiste en el diseño y simulación micromagnética de estructuras magnéticas nanoscópicas con diversas morfologías, tales como esferas, hilos y/o nanotubos de diferentes aleaciones magnéticas, con potencial impacto en soluciones tecnológicas vinculadas al diseño y fabricación de dispositivos. Las simulaciones micromagnéticas se realizan mediante el software OOMMF (<https://math.nist.gov/oommf/>) y constituyen valiosas herramientas para predecir y/o corroborar el comportamiento magnético experimental de las nanoestructuras estudiadas.

>>> **Docente:** Noelia Bajales Luna – Correo: noelia.bajales.luna@unc.edu.ar

Más información:

https://www.conicet.gov.ar/new_scp/detalle.php?id=29466&keywords=noelia%2Bbajales%2Bbluna&datos_academicos=yes

