

## GRUPOS DE INVESTIGACIÓN INFAP

- **VIDALES, ANA: Grupo de Sistemas Granulares y Redes Complejas:** Sistemas granulares y sus propiedades fundamentales, aplicaciones a la minería, almacenamiento de granos, industria farmacéutica, y otras. Redes complejas de sistemas no lineales.

Nuestro grupo trabaja en el estudio del comportamiento de medios materiales en forma de granos, comúnmente llamados MEDIOS GRANULARES. Ellos abarcan infinidad de sistemas como los alimentos en granos, los fármacos, los fertilizantes, las dunas de arena, suspensión de partículas nanométricas, movimiento de placas y rocas a nivel geológico, entre muchos otros. Nos interesa resolver los problemas físicos involucrados en el transporte y manipulación de estos medios, como, por ejemplo: su mezcla, la segregación, los atascos, el flujo y la compactación. Aplicamos nuestros resultados a problemas concretos a nivel industrial.

**Línea de Simulación Numérica:** Mezcla y segregación de partículas; Compactación de granos de distintas geometrías; Drenaje de partículas secas y húmedas en tolvas; Estabilidad en apilamientos bidimensionales.

**Línea Experimental Básica:** Dispersión de partículas; Compactación de partículas con forma de pentágonos; Ángulos de estabilidad y Segregación en apilamientos bidimensionales.

**Línea Experimental Aplicada:** Caracterización de áridos para uso vial; Flujo de materiales granulares secos y húmedos en tolvas; Ángulos de talud.

### EQUIPAMIENTO:

- Equipo de silo y tolvas intercambiables de varias medidas.
- Balanza con adquisidor de datos para medida de flujo.
- Mesa de medida para ángulos de cráter con diferentes aperturas.
- Cuba y dispositivo goniométrico de medida de diferentes ángulos de talud.
- Equipo de mano necesario para manipulación de áridos (bandejas metálicas, contenedores, elementos de vidrio de laboratorio, etc.)
- 2 PC Pentium III y IV.
- 2 PC con procesadores Intel Core 2 Duo.
- Acceso a red de computadoras (con más de 20 procesadores Pentium III y IV) del INFAP.
- Acceso a Biblioteca de la UNSL con todos los servicios electrónicos de SECyT.
- Acceso cuadrado a los equipos del Laboratorio de suelos del Departamento de Minería.
- Infraestructura administrativa y académica del departamento de Física de la UNSL.
- Infraestructura edilicia: 50 metros

- **SAPAG, KARIM: Laboratorio de Sólidos Porosos:** Desarrollo, síntesis y caracterización de sólidos porosos, procesos de adsorción y reacciones moleculares, aplicaciones a almacenamiento y separación de gases y a procesos catalíticos.

Desarrollo, síntesis y caracterización de sólidos porosos, procesos de adsorción y reacciones moleculares.

Aplicaciones a almacenamiento y separación de gases y a procesos catalíticos.

#### **Línea a: Materiales microporosos**

Se sintetizan y caracterizan materiales microporosos a partir de residuos de la industria agrícola de la zona de Cuyo. Los materiales fundamentalmente desarrollados son los carbones activados, utilizando como materia prima madera, carozos y cáscara de frutas. Estos materiales se estudian en diferentes formas, como polvo, granos y conformados. Su aplicación específica está basada en procesos de adsorción para el almacenamiento de gases energéticos, como metano e hidrógeno, y en procesos de descontaminación ambiental. Una aplicación más reciente de estos materiales es en la separación de gases, donde se estudian además nanomateriales, como nanotubos de carbón o

nanocuernos, en colaboración con grupos externos.

#### **Línea b: Materiales mesoporosos**

Los materiales sintetizados en esta línea comprenden los basados en arcillas naturales y en productos químicos sintéticos de la familia del Si y el Al. Los obtenidos a partir de arcillas naturales son micro-mesoporosos, obteniendo las llamadas arcillas pilareadas, donde se han utilizado diversos compuestos químicos en su síntesis como Al, Zr, Fe y Co. Dentro de los materiales mesoporosos propiamente dichos, se desarrollan familias basadas en las llamadas MCM (Mobil Crystalline Mesoporous) y las SBA (Santa Bárbara Amorphous Materials), donde se estudia su síntesis, las variaciones en las mismas y la afección en características finales. Las aplicaciones de estos materiales son catalíticas, en colaboración de grupos externos, y se pretende estudiarlas en el almacenamiento de gases dentro del grupo. Actualmente se está poniendo a punto una línea propia de catálisis.

#### **Línea c: Materiales macroporosos**

Esta línea de reciente creación se basa fundamentalmente en el conformado de materiales, mediante prensado o extruido, donde el material final posee estructura macroporosa por la unión o adhesión de unidades micro-mesoporosas. Los materiales obtenidos son los llamados monolitos, que poseen diversas aplicaciones, fundamentalmente en el área de Catálisis medioambiental.

#### **EQUIPAMIENTO:**

##### **Equipamiento de laboratorio especial**

Equipo de análisis térmico diferencial DTA Shimadzu.

Equipo TPR, TPD, TPO ChemBET 3000 Quantachrome.

Sorptómetro de gases para medidas de textura, Autosorb 1MP Quantachrome.

Quimisortómetro de gases para medidas de textura y de composición Superficial, ASAP 2010 Micromeritics

Porosímetro de Mercurio, Autopore III Micromeritics.

Sorptómetro manométrico de alta presión, HPA100 VIT corporation.

Equipo de microreacción con analizador on line (cromatógrafo Perkin Elmer con FID y TCD).

Planta de Producción de Nitrógeno Líquido PN-40 Chryomech.

**Equipamiento de laboratorio para operaciones unitarias**

Estufa de secado y esterilización ORL.

Mufla programable hasta 1200 grados centígrados ORL.

Hornos horizontales (2), hasta 1000°C, con controlador de temperatura programable.

Rotavapor marca Decalab.

Balanza analítica Ohaus, 210 g, 0,1mg de precisión.

Placas calefactores (3) con termosonda y agitación magnética, marca ORL.

Termo-Conductímetro digital Hanna.

Termo-pHmetro digital Hanna.

Baños termostáticos.

Material de vidrio y de laboratorio.

- **MARCHESE, JOSÉ: Laboratorio de Membranas:** Desarrollo, síntesis y caracterización de membranas, procesos separativos y de filtración, aplicaciones industriales y ambientales.

Nuestro grupo estudia el desarrollo de Tecnologías separativas mediante la modificación y/o síntesis de nuevos materiales destinados a la separación de gases, clarificación y concentración de jugos y el tratamiento de efluentes líquidos.

Se realizan además estudios de difusión, sorción y modelizado de los Fenómenos de Transporte en films, membranas, procesos separativos y de filtración y sus aplicaciones industriales y ambientales

**Línea de Síntesis de Polímeros para procesos de membranas:** Separación de Hidrógeno mediante membranas de poli (Acrilonitrilo Butadieno y Estireno) y de matriz mixta con carbones activos como fase dispersa inorgánica. Sintetizado de poliimidias como precursoras de membranas de tamiz molecular de carbón. Desarrollo de membranas iónicas poliméricas para utilizarlas en celdas de combustible de metanol.

**Línea de Desarrollo de Membranas Poliméricas para Alimentos:** Membranas poliméricas hidrofílicas de ultra/microfiltración de bajo ensuciamiento para ser aplicadas en el procesamiento de jugos de cítricos con alto valor nutricional. Conservación de los alimentos mediante desarrollo de cubrimientos para vegetales y frutas constituidos por biopolímeros.

**Línea Membranas Líquidas Emulsionadas:** Se estudian membranas líquidas emulsionadas de LIX, Ac, alquilfosforico y aminas de alto peso molecular para el transporte de iones metálicos en solución acuosa.

**Línea de Inmovilización de Enzimas:** Estudio de la inmovilización de enzimas proteolíticas utilizando microcápsulas de Alginato para su aplicación a procesos industriales de interés farmacéutico y bromatológico.

**Línea de Microcápsulas para el Tratamiento de Iones Metálicos:** Desarrollo de microcápsulas conteniendo compuestos quelantes específicos para la remoción de iones metálicos tóxicos de soluciones acuosas.

**Línea de Desarrollo de Membranas Poliméricas para Tratamiento de Efluentes Oleosos:** Desarrollo de membranas poliméricas de ultrafiltración, con altos flujos y bajo ensuciamiento, y membranas cargadas para el tratamiento de efluentes oleosos.

#### **EQUIPAMIENTO:**

- Equipo para Adsorción Física y Química, Micromeritics ASAP2000
- Porosímetro de Intrusión de Mercurio, Micromeritics AutoPore
- Equipo para análisis de tamaños de partículas por RX
- Microscopio nanométrico STM y AFM, modelo DIGITAL de resolución atómica para trabajo a presión atmosférica
- 2 Cromatógrafos Gaseosos Shimadzu (AFM/STM GC-8A).
- Espectrómetro de Absorción Atómica (Varian)
- HPLC, Beckman con detectores de Índice de Refracción y UV.Visible
- Espectrofotómetro UV-Visible Hitachi
- Horno Cerámico Semi-industrial con programación de temperatura, Nabertem
- Horno Cerámico banco con Programación de temperatura, Termolyne 46200
- Extrusora escala piloto para Material Cerámico
- Rotavapor Buchi R-144
- Refractómetro Automático Index Instruments
- Molino de Molienda Rotatorio Resch
- Porómetro de Flujo Capilar Automático -Porómetro de Desplazamiento Liq-Liq.
- FTIR en licitación FONCYT.
- 2 Equipos de permeabilidades líquidas y 2 gaseosos escala laboratorio
- Equipo de ultrafiltración escala piloto Pellicon con accesorios (XX42 PELSO)
- Equipo de ultrafiltración escala laboratorio Minitan S (XX42 MT 075)
- Equipo de microfiltración escala piloto para membranas cerámicas tubulares
- 2 equipos de solubilidades de gases en sólidos
- 4 Baños Termostáticos - Agitadores mecánicos
- Balanzas analíticas y granatarias
- Estufa de secado y esterilización
- Mufla programable hasta 1200 grados centígrados
- Balanza analítica 210 g, 0,1mg de precisión
- Placa calefactora con termosonda y agitación magnética
- Termo- Conductímetro digital - Termo-pHmetro digital

- **ZGRABLICH, JORGE: Laboratorio de Físicoquímica de Superficies:**  
Espectroscopías XPS, AES y TPD en Ultra Alto Vacío, microscopía nanoscópica de efecto túnel y de fuerza atómica, procesos moleculares en superficies, nanoporos y nanopartículas. Aplicaciones a sistemas nanoestructurados.

En el Grupo se utilizan métodos experimentales de fisicoquímica de superficies, de análisis de superficies en ultra-alto-vacío (XPS, AES y TPD) y de microscopía nanoscópica de Efecto Túnel y de Fuerza Atómica, combinados con métodos teóricos de Termodinámica Estadística, DFT y Simulación de Monte Carlo, para contribuir a la caracterización estructural de los sistemas estudiados y a la comprensión a nivel molecular de los procesos fisicoquímicos que se llevan a cabo en dichos sistemas.

#### **EQUIPAMIENTO:**

**Experimental:** Equipo de Ultra Alto Vacío UHV, con distintas técnicas de análisis de superficies: AES, XPS, TPD. Microscopio de Fuerza Atómica (AFM, STM).

**Computacional:** Diversas PC tipo Core2 Duo y Quad bajo sistema *Linux / Cóndor*, en el cluster de cálculo *Baco*.

- **PEREYRA, VICTOR: Grupo Cinética de Procesos en Superficies e Interfases:**  
Mecánica estadística de la fase adsorbida, Cinética de la fase adsorbida, Simulación del fenómeno de rozamiento.

Se realiza el estudio de la mecánica estadística de la fase adsorbida mediante diferentes metodologías, incluyendo desarrollos analíticos y simulación por Monte Carlo.

Durante la primer etapa del proyecto se desarrolló una nueva metodología para resolver el modelo de gas de red cinético, denominado reglas de evolución local. Esta metodología ha mostrado ser una herramienta simple y eficiente para resolver problemas de superficie.

El comportamiento de la fase adsorbida se analiza a través de los observables dinámicos y en equilibrio de cada sistema en particular. Se desarrolló un algoritmo de simulación de Monte Carlo para el cálculo de la función densidad de estado. El algoritmo es de gran versatilidad, eficiencia y de fácil implementación en todos aquellos problemas de la mecánica estadística. A diferencia de los ya conocidos, no presenta el problema de convergencia.

La aplicación de las reglas de evolución local fue aplicado al crecimiento de interfases con y sin anclaje donde la aproximación de la ecuación maestra es ineficiente o inaplicable.

El fenómeno de rozamiento se analiza utilizando el modelo de Tomlinson. Para ello se analiza el experimento realizado sobre un microscopio de fuerza atómica donde

un tip se desliza sobre una superficie. En la actualidad se ha logrado reproducir la dependencia de la fuerza de fricción con la velocidad de arrastre del tip que se verifica en los datos experimentales.

**EQUIPAMIENTO:**

- 4 PC Core 2 Quad, 2.4 2 Gb RAM
- 3 PC Sempron 3000+ 512 Mb RAM
- 3 PC Athlon 2000 256 Mb RAM
- 2 PC Athlon 6400+ 1Gb RAM
- 5 PC Sempron 2400+ 512 Mb RAM

Se utilizan los sistemas operativos *Windows* y *Linux* con el sistema de gestión de colas de procesos (con mecanismo de checkpoint y prioridad) llamado *Condor*.

- **RAMIREZ PASTOR, JOSÉ: Grupo de Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos:** Sistemas uni- y bi-dimensionales y sus propiedades fundamentales. Transiciones de fase. Sistemas desordenados. Procesos de Transporte. Fenómenos de adsorción. Sistemas magnéticos y vidrios.

Se estudian sistemas complejos en el marco de la Mecánica Estadística. Se discute: (a) el comportamiento de sistemas magnéticos desordenados (vidrios de espín) para responder dos importantes preguntas: ¿el modelo usado da verdaderamente cuenta de las propiedades de memoria magnética? y ¿cómo describir una fase ordenada a baja temperatura?; (b) estudio de deposición y crecimiento de moléculas sobre fractales y percolación en redes de alta correlación local; (c) propiedades de adsorción y transporte en superficies heterogéneas y monocapas con interacciones no-aditivas y (d) estudio de modelos teóricos de dieléctricos para líquidos polares y su verificación experimental.

Los resultados previstos son de interés teórico y tecnológico. Se utilizará tanto simulación numérica como aproximaciones teóricas en el marco de los modelos de gas de red.

**EQUIPAMIENTO:**

**Cluster Baco:**

- 10 CPU Athlon 2000+, 256MB de RAM
- 30 CPU Sempron 2400, 256MB de RAM
- 10 CPU Sempron 2800, 256MB de RAM

**Cluster Baco2:**

- 10 CPU Pentium D 2.8, 512MB RAM
- 8 CPU Core2 Duo 2.33, 512MB RAM
- 8 CPU Core2 Duo 2.33, 1GB RAM
- 10 CPU Core2 Quad 2400, 2GB RAM



Todas las unidades funcionan bajo el sistema operativo *Linux (Red Hat)* y con el sistema de gestión de colas de procesos (con mecanismo de checkpoint y prioridad) llamado *Condor*.

**antorami@unsl.edu.ar**