



RICARDO JUAN FACCIO  
SGIOROVELLO

Dr.

[rfaccio@fq.edu.uy](mailto:rfaccio@fq.edu.uy)  
<http://cryssmat.fq.edu.uy/ricardo/ricardo.htm>

Av. Gral. Flores 2124. CC 1  
157. CP 1800. Montevideo.  
Uruguay  
+ 598 2 924 98 59

### SNI

Ciencias Naturales y Exactas /  
Ciencias Químicas  
Categorización actual: Nivel  
III (Activo)

Fecha de publicación: 13/04/2024  
Última actualización: 13/04/2024

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química / Área Física - DETEMA / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química / Sector Educación Superior/Público / Área Física, DETEMA

Dirección: Av. Gral. Flores 2124. CC 1157 / 11800

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: (+598) 29249859

Correo electrónico/Sitio Web: [rfaccio@fq.edu.uy](mailto:rfaccio@fq.edu.uy) <http://cryssmat.fq.edu.uy/ricardo/ricardo.htm>

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (2003 - 2007)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio de la planaridad estructural en cerámicos Tecnológicos

Tutor/es: Prof. Dr. Álvaro W. Mombrú

Obtención del título: 2007

Financiación:

Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Palabras Clave: Magnetismo Estructura Electrónica EXAFS XANES Difracción de Neutrones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Material, Cristalografía, Nanotecnología y Simulación por DFT

#### GRADO

##### Ingeniería Química (2000 - 2003)

Universidad de la República - Facultad de Ingeniería , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: INPET- Industria del reciclado del Polietileno Tereftalato

Tutor/es: Ing. Quím. Raul Prando

Obtención del título: 2003

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Polímeros

##### Bachiller en Química (1997 - 2000)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Bachiller en Química

Obtención del título: 2000

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bachiller en Química

### Formación complementaria

## CONCLUIDA

### CURSOS DE CORTA DURACIÓN

#### **Spring College on Computational Nanoscience (01/2010 - 01/2010)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / International Centre of Theoretical Physics , Italia  
100 horas

Palabras Clave: Nanotechnology Nanoscience

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Nanotecnología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotechnology

#### **National School on Neutron and X-ray Scattering (NSNXS 13 al 27/8/2006) (01/2006 - 01/2006)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Argonne National Laboratory , Estados Unidos  
104 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Caracterización Física de materiales

#### **School On Synchrotron Radiation And Applications (01/2006 - 01/2006)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / The Abdus Salam International Centre for Theoretical  
Physics , Italia

120 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Caracterización Física de materiales

#### **Ino2000: Inorgánica desde el núcleo a los octaedros (01/2000 - 01/2000)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

### PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

#### **Estancia de investigación (2010)**

Tipo: Otro

Institución organizadora: International Center for Theoretical Physics - ICTP, Italia

Palabras Clave: graphene DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotechnology

#### **Curso de Polimorfismo en el marco del "II Latin American Symposium on Polymorphism and Crystallization of Drug and Pharmaceutical Products (LAPOLC 2009)" (2009)**

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Universidad de Sao Paulo, Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Polimorfismo

#### **Workshop on novel methods on electronic structure calculations, and 6th FPLO Workshop (2007)**

Tipo: Taller

Institución organizadora: Universidad de La Plata, Argentina

#### **Simposio Latino Americano de Polimorfismo y Cristalización en Fármacos y Medicamentos (2007)**

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Universidad Federal de Ceará, Brasil

#### **V Congreso Iberoamericano de Sensores (2006)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Facultad de Ciencias - ANTEL, Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Polímeros, Biomateriales  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Preparación de materiales

### "Nanotecnología dictado por la Prof. Tatiana Makarova (2002)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Facultad de Ingeniería, Uruguay

## Idiomas

### Inglés

Entiende muy bien / Habla bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### Español

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### Portugués

Entiende muy bien / Habla regular / Lee muy bien / Escribe regular

## Áreas de actuación

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Física de Materiales Cerámicos y Nanoestructurados

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis de Nuevos Materiales Cerámicos y Nanoestructurados

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cristalografía de compuestos orgánicos e inorgánicos

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Cálculos de Estructura Electrónica por "Density Functional Theory-DFT"

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Preparación de Biomateriales

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Preparación y modelado de materiales para aplicación en energía

## Actuación profesional

### SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Química / Área Física, DETEMA

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### Funcionario/Empleado (02/2021 - a la fecha) Trabajo relevante

Profesor Titular de Física (Full Professor) 40 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 5

Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (02/2014 - 02/2021)**

Prof. Agregado de Física, Grado 4 40 horas semanales / Dedicación total  
Desempeño actual como Profesor Agregado de Física, Grado 4, efectivo con Dedicación Total. He trabajado en la cátedra de Física del DETEMA desde el año 1999, habiendo pasado por todos los cargos docentes (grado 1, grado 2, grado 3 y actualmente grado 4).  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 4  
Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (11/2008 - 02/2014)** Trabajo relevante

Prof. Adjunto de Física, Grado 3 35 horas semanales / Dedicación total  
Se trata de mi pasaje a Prof. Adjunto habiendo sido anteriormente asistente y ayudante de física. Siempre en el mismo lugar, ingresando el 6/8/1999  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (02/2006 - 11/2008)**

Asistente de Física, G2 40 horas semanales / Dedicación total  
Se trata de mi desempeño como Asistente de Física, grado 2, luego de haberme desempeñado como asistente G2 y ayudante G1 interino desde el 6/8/1999.  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (08/2002 - 02/2006)**

Asistente de Física, G2 40 horas semanales  
Concurso y pasaje como Asistente de Física, grado 2, interino.  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/1999 - 08/2002)**

Ayudante de Física 20 horas semanales  
Inicio de mi actividad docente  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**ACTIVIDADES****LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN****Cálculos de Estructura Electrónica de Materiales Nanoestructurados y Cerámicos (01/2004 - a la fecha )**

Es esta la línea que el suscrito actualmente dirige. Aquí gracias al uso de diferentes métodos que utilizan DFT (Density Functional Theory) se realizan simulaciones de la estructura electrónica de materiales sólidos. En particular para el caso de sistemas cerámicos se evalúa la estabilidad de diferentes fases estructurales, para luego evaluar la estabilidad de los arreglos magnéticos. Extrayendo de esta forma información muy valiosa y sencillamente contrastable con aquella obtenida a partir de experimentos, tal como son las propiedades hiperfinas, que contrastan con Espectroscopia Mössbauer. En el caso de sistemas nanoestructurados se trabaja con sistemas gráficos que presentan defectos. En este sentido se ha aplicado un posible modelo para el mismo, en el cual fue posible obtener una situación magnética compatible con la determinada experimentalmente. Al tiempo que se logra una reproducción de las tendencias estructurales generadas por el magnetismo espontáneo y la presencia de defectos. El primer trabajo ha sido publicado en 2008 (Faccio PRB 2008), y constituye uno de los PRIMEROS trabajos sobre "Estructura Electrónica" en Sólidos y en especial sobre materiales NANOESTRUCTURADOS del país, y recibió el primer premio en el V Congreso Iberoamericano de Sensores (2006). Al mismo tiempo se han realizado estudios sobre Nanotubos de carbono, nanocintas, grafeno, estudiando el efecto de dopantes, defectos, confinamiento, etc. Más recientemente se incorpora el cálculo de propiedades ópticas de materiales, con el objetivo de diseñar y modelar nuevos sistemas de aplicación en celdas solares. Esto implica el diseño de nuevas tintas y pigmentos, y de

semiconductores nanoestructurados. Se han dirigido dos tesis de doctorado y se dirigen tres tesis de posgrado más que incorporan esta herramienta para el modelado de diversos materiales.

20 horas semanales

Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales - Centro NanoMAT , Coordinador o Responsable

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ

Palabras clave: DFT First Principles Nanotechnology

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Cristalografía, Materiales y Simulaciones

#### **Síntesis y caracterización de nuevos materiales nanoestructurados (01/2003 - a la fecha )**

Otra de las líneas de investigación consiste en la preparación de nanomateriales. En la misma se incluye la preparación de nanopartículas metálicas, fullerenos, nanotubos de carbono y grafito modificado magnéticamente. Estos materiales han abierto una puerta para la obtención de nuevas propiedades físicas, convirtiéndolos en altamente atractivos para futuras aplicaciones tecnológicas. La modificación de la estructura del grafito ha permitido generar en el mismo un ferromagnetismo espontáneo, gracias a la generación de vacancias y defectos a nivel de su nanoestructura. Estos trabajos han permitido obtener varios trabajos publicados en revistas internacionales y la publicación de trabajos en varios congresos. De esta forma se han generado trabajos paralelos vinculados al mismo, intentando explotar las posibles aplicaciones tecnológicas del mismo. Por otra parte, se preparan y caracterizan nanotubos inorgánicos, basados en óxido de titanio, principalmente para aplicación en celdas solares sensibilizadas con colorante

5 horas semanales

Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat , Coordinador o Responsable

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ , HELENA PARDO

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Síntesis de nuevos Materiales Nanoestructurados  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Físico-Estructural de materiales Nanoestructurales

#### **Síntesis de nuevos materiales cerámicos: Magnetismo & Superconductividad (01/2003 - a la fecha )**

El objetivo principal es el de obtener materiales cerámicos de estructura pseudo-perovskita de fórmula general  $REBaM_1M_2O_5$  ( $RE = Y$  y lantánidos;  $M_1$  y  $M_2 = Fe, Cu, Co$ ). Las estructuras de estos compuestos se derivan del superconductor de alta temperatura crítica  $YBa_2Cu_3O_{7-d}$ , y estas se distinguen por tener transiciones antiferromagnéticas, dependientes tanto del tipo de lantánido utilizado así como también del contenido de oxígeno no estequiométrico. De esta forma se logra, mediante modificación química, obtener arreglos magnéticos variados ajustando así las propiedades físicas del material. Por otro lado se encuentran las estructuras del tipo  $REBaMn_{2-x}Fe_xO_5$ , que se encuentran estrechamente vinculadas con las de la forma tipo  $RE_{1-x}A_xMnO_3$ . Estos cerámicos presentan un importante cambio en su resistividad eléctrica al aplicar un campo magnético, generando así el efecto denominado Magneto Resistividad Gigante (GMR). En particular se han sintetizado muestras con  $RE = La$  y  $Pr$ . En este marco el postulando durante el desarrollo de sus tesis doctoral sintetizó y caracterizó desde el punto de vista físico-estructural la serie  $Y_{1-x}Nd_xBaCuCoO_5$ . Para ello se hizo uso de Difracción de Rayos X Síncrotron, Absorción de rayos X de estructura fina (EXAFS y XANES), para finalmente aplicar Difracción Magnética de Neutrones en la caracterización física. Adquiriendo de esta forma múltiples destrezas para la caracterización físico-estructural de materiales.

5 horas semanales

Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat , Integrante del equipo

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ , HELENA PARDO

Palabras clave: EXAFS XANES Difracción de Rayos X por Polvo Difracción de Neutrones por Polvo Susceptometría

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Físico-Estructural de materiales Nanoestructurales  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Síntesis de materiales cerámicos

#### **Caracterización estructural de Nuevos Materiales (01/2003 - a la fecha )**

Las síntesis y las caracterizaciones físico-estructurales requieren de una fluida interacción

interdisciplinaria. En particular, en el área de materiales, las disciplinas que más requieren de esta interacción son las químicas y las físicas. En este sentido el Cryssmat-lab dispone de un plantel formado adecuadamente para poder llevar a cabo esta labor, pero dentro del grupo mismo, utilizando facilidades internacionales para la realización de experimentos. Estos corresponden a difracción de rayos X, difracción de neutrones, absorción de rayos X (EXAFS y XANES), espectroscopía Mössbauer, función de distribución de pares (PDF), espectroscopía Raman, susceptometría AC y DC, Espectroscopía de dispersión de energía (EDS), microscopías electrónicas SEM y TEM, microscopías de fuerza atómica AFM y de fuerza magnética MFM. Dentro de estas líneas el suscrito se desempeña activamente en la realización de refinamientos Difracción de rayos X, Difracción de Neutrones, Absorción de rayos X (EXAFS y XANES) y Susceptometría DC. Esto ha permitido, gracias al uso de la difracción de rayos X de polvo, realizar más de 150 asesoramientos a industrias nacionales en los últimos años. Solucionando problemas vinculados a polimorfismo, mezclas multifásicas, etc. De esta forma durante el año 2007 se ha creado el Centro de Análisis por Difracción de Rayos X (CADifRaX), del cual el suscrito es el responsable de gestión de servicios.

5 horas semanales

Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat, Integrante del equipo

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN, ÁLVARO W. MOMBRÚ, HELENA PARDO

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Síntesis de materiales cerámicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Físico-Estructural de nuevos materiales

#### **Preparación de Biomateriales (01/2007 - a la fecha)**

Se están dando pasos hacia la síntesis de biomateriales que permitan sustituir los que hoy en día se utilizan, y que por lo prohibitivo de sus precios es inaccesible para una gran parte de la población nacional. En este contexto se incluyen materiales de reposición estructural esquelética para implantes basados en apatitas (proyecto CSIC I+D tecnológico), así como síntesis piel artificial para regeneración dérmica en casos de lesiones severas. Este último proyecto ha sido recientemente financiado por la CSIC en su llamado "Llamado a Proyectos de Investigación Orientados a la Inclusión Social -2008" y del cual el suscrito es Co-Responsable.

5 horas semanales

Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat, Coordinador o Responsable

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ, HELENA PARDO, CECILIA GOYENOLA

Palabras clave: Piel Artificial Apatitas Polímeros

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Preparación de Biomateriales

#### **Diseño, preparación y modelado de Materiales para aplicación en Energía (01/2009 - a la fecha)**

Más recientemente se ha puesto foco en el desarrollo de nuevos materiales de aplicación en energías renovables, particularmente en dos líneas: 1) Celdas Solares: Se preparan titanatos nanoestructurados como semiconductores, y se diseñan nuevas tintas/pigmentos; todos ellos para su uso en celdas solares. Se ha colaborado en un proyecto FSE (Responsable Dr. Mombrú), se ha dirigido una tesis de Doctorado en la temática (Dra. L. Fernández). 2) Conductores de Li: No solo es importante convertir energía solar en energía eléctrica, sino que es importante almacenar esa energía. En ese sentido una área de importante desarrollo actual es el uso de titanatos dopados que funcionan como conductores de Litio. Este proyecto ha sido recientemente financiado por un proyecto FSE-ANII (Responsable: R. Faccio).

Fundamental

20 horas semanales

Facultad de Química, Centro NanoMat & Cryssmat-Lab. DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: A. W. MOMBRÚ, LUCIANA FERÁNDIZ-WERNER, R. FACCIO

Palabras clave: SOLAR CELLS nanomateriales Lithium Conductors

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Preparación y modelado de materiales para aplicación en energía

### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

#### **Preparación y estudio de materiales carbonosos avanzados (01/2019 - a la fecha)**

Se propone continuar con la línea de investigación del grupo de varios años sobre nuevos

materiales, en particular aquellos basados en estructuras carbonosas. En esta propuesta se estudiarán nuevas estructuras carbonosas con diferentes formas de presentación, con distintas dimensionalidades, funcionalidades y relaciones estructurales entre ellas y con otros materiales como polímeros. De esta forma el proyecto plantea el diseño y la preparación de estos materiales, su caracterización física y estructural y su aplicación en dispositivos piloto de celdas solares. Finalmente y para completar la comprensión de los resultados obtenidos y para poder realizar proyecciones descriptivas de estos sistemas, se realizarán simulaciones computacionales basadas en Density Functional Theory, DFT. De esta forma, esta propuesta plantea un enfoque de investigación completa de los materiales en estudio, con una fuerte componente en la comprensión fundamental de los sistemas carbonosos, pero también con proyección hacia la potencial aplicación tecnológica de los mismos.

2 horas semanales

Facultad de Química, Centro Nano-Mat, DETEMA

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Doctorado:2

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Ricardo Juan FACCIO SGIOROVELLO, Alvaro Washington MOMBRÚ RODRÍGUEZ (Responsable), Helena PARDO MINETTI, Mariano ROMERO OLIVERA, Martín Esteves, Luciana FERNÁNDEZ WERNER, Fernando Pignanelli, Dominique Lourdes MOMBRÚ CRUCES

Palabras clave: Materiales carbonosos Nanotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y Ciencia de Materiales

#### **Nanoscale phenomena with ultrathin films (10/2018 - a la fecha)**

This application gives the onset of a new collaborative partnership in research and education between Assoc. Prof. Anelia Kakanakova, active in the Division of Semiconductor Materials, Department of Physics, Chemistry and Biology (IFM), Linköping University, Sweden; and Assoc. Prof. Dr. Ricardo Faccio, active in the NanoMat Group, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay. To establish a long-term basis for collaboration in research and education, we propose a project on exploring nanoscale phenomena with ultrathin films by complementing the resources, knowledge, competence, and expertise of the partnership units in this rapidly expanding field of materials science. We will integrate modern-technology-relevant research with educational activities on individual, group, and institutional levels; so that to deliver continuous strengthening, broadening, and recognized excellence of our research and educational platforms.

10 horas semanales

STINT Initiation Grants / 2018-05-08

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:3

Financiación:

Linköpings Universitet, Suecia, Apoyo financiero

Equipo: Ricardo Juan FACCIO SGIOROVELLO, Alvaro Washington MOMBRÚ RODRÍGUEZ, Dominique Lourdes MOMBRÚ CRUCES, Luciana FERNÁNDEZ WERNER

Palabras clave: nanoscale molecular dynamics 2D materials semiconductors simulation DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

#### **Programa de Fortalecimiento del Equipamiento de Investigación en los Servicios de la UdelaR, CSIC 2019. "Adquisición de Difractómetro de rayos X de Polvo para la caracterización de materiales cristalinos con distintos campos de investigación" (08/2019 - a la fecha)**

Adquisición de Difractómetro de rayos X de Polvo para la caracterización de materiales cristalinos con distintos campos de investigación.

10 horas semanales

Facultad de Química, Área Física

Investigación  
Coordinador o Responsable  
En Marcha  
Alumnos encargados en el proyecto:  
Doctorado:4  
Financiación:  
Facultad de Química, Uruguay, Apoyo financiero  
Equipo: Ricardo Juan FACCIO SGIOROVELLO  
Palabras clave: Difracción de Rayos X  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Difracción de Rayos X

**Semillero de Iniciativas Interdisciplinarias, El 2018. "Estrategias nanotecnológicas para el control de microorganismos" (12/2018 - a la fecha)**

En los últimos años, la aplicación de nanopartículas para el control de microorganismos se ha expandido considerablemente en las áreas de salud humana y animal, agrícola, y de materiales. La baja dimensionalidad de las nanopartículas incrementa el potencial de penetración permitiendo su mejor utilización en la prevención de infecciones microbianas, en dispositivos médicos, en el tratamiento de enfermedades infecciosas, incluyendo frente a bacterias resistentes a antibióticos, biofilms microbianos, evaluados en estudios in vitro, así como en modelos animales. El potencial antimicrobiano de las nanopartículas es también muy promisorio en el área agro-alimentaria; trabajos recientes demuestran el potencial uso de nanopartículas en la conservación de alimentos, materiales de empaque o el control de fitopatógenos con alto impacto en la agricultura. En este contexto es que esta propuesta interdisciplinaria propone avanzar en la búsqueda y desarrollo de nuevos nanomateriales, para el control de microorganismos que afectan la salud humana y animal, así como la producción agroalimentaria, tanto a nivel regional como internacional. La síntesis y caracterización de nuevos nanomateriales es en sí misma interdisciplinaria. En este sentido se busca integrar las experiencias previas de los integrantes de esta propuesta buscando alcanzar objetivos en común. Asimismo, la aplicación de estos nanomateriales como antimicrobianos implica un abordaje interdisciplinario, incluyendo estudios de la interacción de los nanomateriales con los microorganismos así como ensayos biológicos. De esta manera se busca consolidar un nuevo ámbito de interacción entre las líneas de investigación existentes en las diversas disciplinas, que contribuya a la integración de conocimientos y propicie la formación integral de jóvenes investigadores y estudiantes, así como la promoción y fortalecimiento de actividades de extensión con un enfoque interdisciplinario.

5 horas semanales

Facultad de Química, Área Física, DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:5

Financiación:

Facultad de Química, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Ricardo Juan FACCIO SGIOROVELLO, Silvana Victoria ALBORÉS MALÁN

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología Y Ciencias de Materiales

**Modelado Computacional de Materiales para Aplicaciones Tecnológicas (COMPUMAT) (11/2015 - a la fecha)**

La red tiene como objetivo general promover la excelencia en el área de las ciencias de los Materiales a través de la generación de un ámbito propicio para la interacción e integración de investigadores que desarrollan sus actividades en Universidades Argentinas e investigadores vinculados a Universidades e Institutos de investigación en el extranjero, de modo de facilitar el desarrollo y afianzamiento de actividades académicas en el contexto internacional y regional de cooperación. En un comienzo la red se focalizó en desarrollos y aplicaciones de métodos de primeros principios (ab initio), con la idea de extenderla luego en la dirección del modelado multi-escala que tiene en cuenta las escalas espaciales y temporales reales existentes en un problema físico, junto con la posibilidad de coexistencia de varios fenómenos acoplados. En el modelado multi-escala se plantea una estrategia bottom-up, es decir, partiendo de la descripción mecánico-cuántica de la materia, se sigue un proceso de coarse-graining hasta llegar al continuo (ver Figura). La red propone lograr su objetivo fomentando y fortaleciendo las colaboraciones entre grupos de investigación en Argentina y en el extranjero a través de la generación de espacios virtuales para el

intercambio de información, pasantías, cursos, programas de cálculo y simulación, bibliografía, talleres de trabajo y seminarios virtuales periódicos. A partir de los logros alcanzados en la primera etapa de desarrollo de la Red COMPUMAT (año 2014), los objetivos específicos del Proyecto actual incluyen: 1) el desarrollo y afianzamiento de la movilidad internacional de estudiantes, docentes e investigadores con el objetivo de producir, transferir y/o adquirir conocimiento en campos académicos estratégicos para nuestro país, en campos tales como la innovación tecnológica y energía; 2) la profundización de los lazos académicos entre las Universidades Nacionales y del exterior participante, España; 3) el apoyo para la realización de proyectos conjuntos de investigación que se encuentran actualmente en ejecución entre los nodos participantes de la Red, así como el fomento del desarrollo de nuevos proyectos que puedan surgir; 4) la dirección conjunta de tesis de grado y posgrado en ciencias, ingeniería y profesorado; 5) el diseño e implementación de cursos de posgrado, actualización y capacitación para docentes-investigadores en temas vinculados a metodologías y técnicas de modelado computacional; 6) dictado de seminarios, talleres y foros sobre el uso de herramientas de modelado computacional para la enseñanza de la Física del Estado Sólido y Ciencias de los Materiales; 7) apoyo a las iniciativas institucionales en cuanto al desarrollo de carreras de posgrado en ciencias e ingeniería a través de las direcciones conjuntas de tesis, pasantías de estudiantes e investigadores, y dictado de cursos de posgrado; 8) gestiones tendientes al reconocimiento mutuo de estudios realizados en el marco de la Red; 9) la mayor vinculación e interacción entre los grupos participantes de esta Red con grupos experimentales nacionales e internacionales en pos de lograr una mayor interacción entre teoría-experimento y la perspectiva de avanzar hacia el desarrollo nuevas aplicaciones de interés tecnológico.

2 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Centro NanoMat & Cryssmat-Lab. DETEMA Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Ministerio de Educación, Argentina, Cooperación

Equipo: SUSANA RAMOS, EITEL PELTZER (Responsable)

Palabras clave: Simulación Computacional Electronic Structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**Nanomateriales para almacenamiento de energía: nueva serie de cátodos para baterías de ion-Litio. (FSE\_1\_2014\_1\_102008) (04/2015 - 04/2017)**

Existe la clara necesidad de avanzar hacia la generación de energías limpias y renovables. En este último caso la energía solar y la eólica, por ser intermitentes, muchas veces requieren de almacenamiento de energía, de forma de brindar un suministro energético adecuado y constante. Nuestro primer proyecto FSE se centró en la preparación y caracterización de electrolitos sólidos basados en titanatos para su uso en baterías de Litio. Ahora el trabajo sigue avanzando hacia una tecnología nacional de baterías ion-litio, enfocado en este caso en la preparación, caracterización y desempeño electroquímico de cátodos nanoestructurados de la línea  $\text{LiFePO}_4$ . Esta serie de materiales se presenta como alternativa estratégica, tanto por su bajo costo, como por la seguridad que ofrece. La nanoestructuración del material es clave para lograr el mejor desempeño, particularmente enfocado en la conducción eléctrica y del ion litio. Por ello se plantea el trabajo sistemático en la preparación de nanomateriales de la serie  $\text{LiFePO}_4$ , recubiertos con diferentes polímeros conductores. Para entender el rol de la nanoestructura se debe realizar caracterización química-estructural profunda, para luego proceder a su evaluación como cátodos. Para ello se utilizará microscopía Raman acoplada a microscopía de Fuerza Atómica, necesaria para lograr una caracterización químico/estructural y topológica a escala manométrica. La evaluación electroquímica de los materiales se hará ensamblando una celda cátodo/electrolito/ánodo. Este proyecto permitirá dar otro paso fuerte hacia la generación de tecnología nacional de nanomateriales para energía, formando recursos humanos calificados en el área, e instalando a nivel nacional tecnología de punta para el desarrollo de ésta y otras líneas estratégicas, tal como lo es la nanotecnología/energía. A este hecho se suma el carácter estratégico que tiene el Litio en la región - Argentina, Bolivia, Brasil y Chile- gracias a los importantes yacimientos, constituyendo más al 50% del total mundial.

15 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Centro NanoMat & Cryssmat-Lab. DETEMA Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Maestría/Magister:1

Doctorado:2

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ , HELENA PARDO

Palabras clave: energía nanomateriales y nanotecnología batería ion litio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanomateriales

**Microstructure of polyaniline nanocomposites with in-situ growth ceramic nanoparticles. (11/2016 - 11/2016)**

Project ID 20160292

20 horas semanales

Laboratorio Nacional de Luz Sincrotron - LNLS/CNPEM Brasil , SAXS: Small Angle X-ray Scattering

Investigación

Coordinador o Responsable

Cancelado

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Laboratório Nacional de Luz Sincrotron, Brasil, Apoyo financiero

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , DOMINIQUE MOMBRÚ

Palabras clave: PANI in-situ growth

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

**Estructura electrónica de sistemas semiconductor-tinta para uso en aplicaciones de energía solar. (06/2015 - 06/2016)**

El objetivo general de esta propuesta es generar capacidades para el diseño y estudio de nanomateriales mediante simulación computacional, aprovechando la sinergia que brinda el trabajo entre de grupos de investigación que abordan la misma temática, pero con ópticas complementarias. En este marco se encuentra vital la formación de recursos humanos en el área de interés, a través de la incorporación al trabajo de doctores jóvenes y estudiantes de posgrado. En términos específicos, el objetivo apunta al estudio y diseño de semiconductores con potencial tecnológico en celdas fotovoltaicas sensibilizadas en colorantes basadas en óxido de titanio. Se pretende consolidar la interacción entre las simulaciones teóricas y la síntesis experimental (que ya han sido realizadas por ambos grupos), para brindar así una retroalimentación entre ambas que de cara al diseño de nuevos nanomateriales con propiedades químicas-físicas avanzadas. El grupo Argentino posee una basta experiencia en análisis de densidad de carga y enlace en sistemas nanoestructurados; al tiempo que el grupo uruguayo posee experiencia en el estudio de nanomateriales para celdas solares a nivel teórico (ab initio) y experimental.

2 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República , Centro NanoMat & Cryssmat-Lab. DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:6

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Cooperación

Equipo: IGNACIO LÓPEZ-CORRAL , SANTIAGO VÁZQUEZ , BENJAMÍN MONTENEGRO , GRACIELA BRIZUELA (Responsable)

Palabras clave: Simulación Computacional Celdas Solares nanomateriales y nanotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**Thermo Diffraction on AB2 Samples (03/2015 - 03/2015)**

Among many challenges of using hydrogen as an alternative fuel to fossil fuels, storage is a one of the relevant research topics addressed by scientists today. Hydrogen storage, forming hydride alloys, is a feasible route in view of the difficulties of storing hydrogen as a gas or as a liquid. Our

group has performed several studies on the hydrogen storage capacity, from gas phase and from electrochemical way, in AB<sub>2</sub> and AB<sub>5</sub> type hydrides, also know as Laves phases[1]. We prepared this alloys by arc furnace and the obtained materials were physically characterization by EDS and conventional XRD[2]. We performed several studies in order to evaluate performance of the alloy for the absorption and desorption from the gas phase. The electrochemical behavior for the electrodes were analyzed applying charge /discharge electrochemical analysis with different conditions such as currents and current pulses combined with potential-free studies, all of them in order to study the reversibility of the process. The electrochemical results are very promising [2-3], but we still need further structural characterization of these materials in order to know the role of the different structural phases on the electrochemical performance. While conventional XRD was used to identify different alloys comprising these, it is important to know how to evolve with increasing temperature and in the presence of a hydrogen stream, low but still sufficient for our purposes. Our alloys correspond to the AB<sub>2</sub> phases with the following composition: Zr{Cr1-xMoxNi} (x=0.0, 0.3, 0.6 and 1.0). The preliminary results indicate that the alloys possess two phases: AB<sub>2</sub> (space group P6<sub>3</sub>/mmc, with a ≈ 5.1Å and c ≈ 8.3Å) and binary alloys Ni<sub>x</sub>Zr<sub>y</sub> (x=10-11 and y=7-9). It would be very relevant for us to know how the phases evolve in the presence of temperature changes, from room temperature to 500 C. Additionally, we expect to see the effect of the hydrogen flow, even in the case of a low concentration as is expected in the present experiment (low pressure and low %H<sub>2</sub> composition).

40 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República , Centro NanoMat & Cryssmat-Lab. DETEMA  
Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Laboratório Nacional de Luz Sincrotron, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: VERÓNICA DÍAZ , ERIKA TELIZ , SANTIAGO VÁZQUEZ

Palabras clave: Hydrogen energy Laves Phases

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

### **Diseño y preparación de materiales para almacenamiento de Energía (FSE\_1\_2011\_1\_6458) (10/2012 - 01/2015)**

Este proyecto plantea el estudio de nuevos materiales conductores de Li<sup>+</sup>, cerámicos y nanoestructurados, para su eventual uso en tecnologías para el almacenamiento de energía. Por ejemplo, el interés en estos materiales radica principalmente en su aplicación como electrolitos en baterías recargables de Li<sup>+</sup>. Por ejemplo, el sistema La<sub>0.51</sub>Li<sub>0.34</sub>TiO<sub>3</sub> presenta una conductividad iónica importante. Por tal motivo se propone la preparación y caracterización de las series RE<sub>1/2+x</sub>Li<sub>1/2-3x</sub>BiyTiO<sub>3</sub> y RE<sub>2/3-x</sub>Li<sub>3x</sub>BiyTiO<sub>3</sub>, siendo RE=La, Pr, Nd y Sm. Por otra parte, el uso de nanomateriales ha mostrado importantes avances en el área, provechando la experiencia del grupo de investigación en sistemas derivados del óxido de Titanio, se prepararán y caracterizarán nanoestructuras de óxido de titanio dopadas con Li<sup>+</sup>. En todos los casos la clave consiste en la vinculación estructural (también micro y/o nanoestructural) y las propiedades de los materiales en estudio, como conductividad y análisis de impedancias, de forma tal que se relacione la respuesta eléctrica con el tiempo o la frecuencia. Se espera que el proyecto no solo repercuta en la adquisición de nueva tecnología a nivel país, sino que pretende lograr la formación de recursos humanos altamente calificados para el desarrollo del mismo.

15 horas semanales

Facultad de Química , Centro NanoMat & Cryssmat-Lab. DETEMA

Desarrollo

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Especialización:2

Maestría/Magister:2

Doctorado:1

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ , RICARDO FACCIO (Responsable) , HELENA PARDO , LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , MARIANO ROMERO , IGNACIO LABORDA , MAGDALENA IRAZOQUI

Palabras clave: energía baterías de Litio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Materiales para energía

**Estudio y caracterización de materiales por espectroscopia Micro Raman (EQC\_X\_2012\_1\_14)  
(08/2013 - 08/2014)**

Adquisición de equipo micro Raman por un monto de U\$S 250000 Este proyecto propone la adquisición de un sistema MicroRaman inexistente en el país, a instalarse en el Polo Tecnológico de Pando (PTP) de la Facultad de Química (FQ), para realizar investigación de excelencia y posibilitar la realización de servicios tecnológicos al sistema nacional de innovación. La espectroscopía Raman permite realizar análisis no destructivos sobre muestras sólidas, tanto cristalinas como amorfas, estudios de distribución de homogeneidad y caracterización de impurezas, en materiales en volumen y nanoestructurados. Su aplicación directa es entonces en fármacos principios activos y excipientes-, compuestos bioactivos, polímeros, nanopartículas, liposomas, materiales nanoestructurados y composites, tejidos biológicos. Con la posibilidad de variar la temperatura de la muestra, se puede caracterizar la transformación de polimorfos tema relevante en general y en el estudio de principios activos farmacéuticos en particular- lo que puede ocurrir en diferentes etapas del proceso de producción de fármacos. A su vez la tecnología de MicroRaman permite ampliar la caracterización así como el control de calidad de tejidos de sometidos a procesos de preservación con fines de trasplante terapéutico. Junto al sistema MicroRaman se adquirirán las mejores bibliotecas de espectros Raman disponibles a la fecha, además del software de búsqueda, para potenciar al máximo toda la instrumentación. Este equipamiento permitirá realizar investigación de calidad directamente vinculada a áreas estratégicas así definidas en el PENCTI, permitiendo aumentar el volumen y calidad de las publicaciones científicas. Se estima que el equipamiento permita realizar unos 1400 análisis, y unos 50 servicios tecnológicos para el periodo de ejecución del proyecto correspondiente a un año. Dado que el equipo se instalará en el PTP, la difusión del proyecto será potenciada, ganando visibilidad para un uso intensivo por parte de la comunidad científica, al tiempo que la interacción con el SNI por parte del PTP/FQ promoverá su difusión en el sector productivo nacional.

1 horas semanales

Facultad de Química , Centro NanoMat

Desarrollo

Coordinador o Responsable

En Marcha

Equipo: RICARDO FACCIO (Responsable)

Palabras clave: Raman Equipamiento de Punta

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / ciencia de materiales

**Diseño, preparación y estudio de nanomateriales para espintrónica (06/2012 - 06/2014)**

Realizar investigación de primer nivel mediante la colaboración internacional de grupos de investigación, con el fin de aprovechar las capacidades complementarias. Esto permitirá viabilizar la formación de RRHH de primer nivel, en un ámbito interdisciplinar, aprovechando la sinergia de dos grupos complementarios. Se espera que ambas partes logren consiliar una metodología de trabajo que permita que los estudiantes y colaboradores puedan realizar sus tareas de manera independiente y ágil en ambos lugares de trabajo. Ambos grupos vienen colaborando de forma intensa realizando estudios teóricos/experimentales, por lo tanto consolidar esta colaboración es crucial para la mejora de la calidad del trabajo de investigación de ambos grupos.

2 horas semanales

Facultad de Química , Centro NanoMat & Cryssmat-Lab.

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:4

Financiación:

Institución del exterior, Cooperación

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ , RICARDO FACCIO (Responsable) , LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , ANDRÉ PASA (Responsable) , VINICIUS ZOLDA

Palabras clave: Estructura Electrónica DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología, electronic structure

**Estudio estructural y electrónico de nanotubos y nanohilos de dióxido de titanio derivados de anatasa y TiO<sub>2</sub>(B) mediante simulaciones por primeros principios, evaluación de propiedades ópticas pensando en su aplicación en celdas solares del tipo DSSC (04/2012 - 04/2014)**

En el presente trabajo se plantea el modelado teórico por primeros principios de nanohilos y nanotubos de dióxido de titanio derivados de los polimorfos anatasa y TiO<sub>2</sub>(B). Se pretende dilucidar estructuras estables a escala nanométrica y subnanométrica con morfología lineal y tubular que puedan explicar los hallazgos experimentales y aportar datos al debate actual sobre la estructura cristalina de estas nanoestructuras. Una vez optimizadas, estas serán evaluadas con respecto a su estructura electrónica y posibilidad de interacción con distintos colorantes (catecol, N3, Fe(CN)<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, y nuevos colorantes orgánicos promisorios) pensando en su potencial aplicación en celdas solares de sensibilización espectral.

2 horas semanales

Facultad de Química, DETEMA & Centro NanoMat

Investigación

Otros

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: RICARDO FACCIO (Responsable), LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER (Responsable)

Palabras clave: DFT Nanotechnology DSSC SOLAR CELLS

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología

#### **Diseño y estudio de nanomateriales semiconductores para uso en celdas solares sensibilizadas en colorante. (04/2012 - 12/2013 )**

El objetivo general de esta propuesta es generar capacidades reales para el diseño y estudio de nanomateriales mediante simulación computacional, aprovechando la sinergia que brinda el trabajo entre de grupos de investigación vinculados temáticamente. Se encuentra vital la formación de recursos humanos en la temática, a través de la incorporación de trabajo por parte de doctores jóvenes y estudiantes de posgrado. En términos específicos, el objetivo apunta al estudio y diseño de semiconductores con potencial tecnológico en celdas fotovoltaicas sensibilizadas en colorantes. Se pretende consolidar la interacción entre las simulaciones teóricas y la síntesis experimental (que ya han sido realizadas por ambos grupos), para brindar así una retroalimentación entre ambas que de cara al diseño de nuevos nanomateriales con propiedades químicas-físicas avanzadas. El grupo Argentino posee una vasta experiencia en análisis de densidad de carga y enlace en sistemas nanoestructurados, al tiempo que el grupo uruguayo posee experiencia en el estudio de nanomateriales para celdas solares a nivel teórico (ab initio) y experimental. Todo esto permite el abordaje de una temática de impacto y sumo interés a nivel regional, con la posibilidad de realizar sinergias, y consolidar la colaboración interlaboratorio mediante la formación específica de recursos humanos.

5 horas semanales

Facultad de Química, Centro NanoMat & Cryssmat-Lab.

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ, RICARDO FACCIO (Responsable), HELENA PARDO, LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER, ALFREDO JUAN (Responsable), IGNACIO LÓPEZ-CORRAL

#### **Desarrollo de tecnologías para celdas solares fotovoltaicas basadas en nanomateriales (12/2010 - 12/2012 )**

Este proyecto plantea una línea de investigación y desarrollo, por la cual se tenderá hacia la producción de dispositivos fotovoltaicos de captación de energía solar mediante el empleo de nanomateriales, se avanzará hacia los desarrollos que optimicen su funcionamiento y se estudiará su funcionamiento. Las tecnologías de trabajo estarán basadas tanto en celdas basadas en pigmentos incorporados a semiconductores nanoestructurados dye sensitized solar cells, DSSC-, así como también en celdas preparadas a partir de tintas de aplicación con base nanotecnológica, fundamentadas en semiconductores tipo CIGS (CuIn<sub>1-x</sub>GaxSe<sub>2</sub>). En el primer caso se prepararán prototipos, con la incorporación de modificaciones que aporten hacia la estabilización y la eficiencia de las celdas. En el segundo caso, se prepararán sistemas multicapas, avanzando en la optimización de ensambles. La investigación que presenta este proyecto permitirá proyectar una futura tecnología nacional de celdas solares fotovoltaicas basada en el uso de nanomateriales, ya sea para la producción de celdas completas o partes de las mismas.

8 horas semanales  
Facultad de Química , DETEMA & Centro NanoMat  
Investigación  
Integrante del Equipo  
En Marcha  
Alumnos encargados en el proyecto:  
Pregrado:2  
Maestría/Magister:1  
Doctorado:1  
Equipo: MOMBRÚ (Responsable) , PARDO , FERNÁNDEZ , FACCIO  
Palabras clave: Nanotecnología, DSSC, CIGS  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología

**Network in Advanced Materials and Nanomaterials of industrial interest between Europe and Latin American Countries of MERCOSUR (Argentina-Brazil-Uruguay) (05/2009 - 05/2012 )**

Proyecto aprobado del Seventh Framework Programme, Nanosciencias, nanotechnologies, materials and new production technologies - NMP  
5 horas semanales  
Facultad de Química , DETEMA  
Investigación  
Integrante del Equipo  
Concluido  
Financiación:  
Institución del exterior, Apoyo financiero  
Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , HELENA PARDO  
Palabras clave: Nanotecnología  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / cristalografía, materiales, y nanotecnología

**Structural Characterization of LnBaMnFeO<sub>5.5+d</sub> series (Ln: La, Pr, Nd and Gd) (02/2012 - 02/2012 )**

Proyecto aprobado y financiado por el LNLS para la realización de medidas de difracción de rayos X de alta resolución para muestras de las series LnBaMnFeO<sub>5.5+d</sub>, con Ln: La, Pr, Nd y Gd. Las muestras corresponden a la tesis de posgrado del Qco. Mariano Romero  
40 horas semanales  
Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron LNLS , Difracción de Polvo XPD  
Investigación  
Coordinador o Responsable  
Concluido  
Alumnos encargados en el proyecto:  
Maestría/Magister:1  
Financiación:  
Institución del exterior, Apoyo financiero  
Equipo: MOMBRÚ , PARDO , ROMERO , SUESCUN  
Palabras clave: LnBaFeMnO<sub>5+d</sub>  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Sistemas cerámicos magnéticos

**A la búsqueda de una solución para el tratamiento de lesiones y quemaduras en población de riesgo (10/2008 - 10/2010 )**

El proyecto pretende avanzar hacia una alternativa de curación y tratamiento de lesiones dérmicas. Este tipo de lesiones ocurre con mayor frecuencia en franjas de población socialmente más excluida, tanto por lo precario de sus viviendas como de los sistemas de calefacción utilizados. La adquisición de los segmentos dérmicos sintéticos comercialmente disponibles a nivel internacional, son, por su muy alto costo, una alternativa de difícil acceso, comprometiendo así la posibilidad de supervivencia y la calidad de vida de los pacientes más afectados. Lo que plantea este proyecto es la obtención, en forma reproducible, de un material de recubrimiento dérmico que permita la curación tópica de lesiones proveniente de: quemaduras, úlceras diabéticas, por abrasión o por presión, a través de la promoción de una zona aséptica y la regeneración tisular. El principal componente de este material se trata de colágeno soluble proveniente de tendón bovino. Uruguay es uno de los pocos países que a nivel mundial poseen el status de ser libres de la encefalitis espongiforme bovina

(vaca loca). Por ello el diseño de una solución dérmica de esta naturaleza se presenta como una oportunidad especial, como lo es hoy en día para otros países que ostentan esta misma condición, como por ejemplo Nueva Zelanda, en donde se hace un aprovechamiento intenso de este recurso. El objetivo final de este proyecto es lograr un material cuyo costo sea notoriamente inferior respecto de los que hoy en día se comercializan a nivel internacional permitiendo su utilización a nivel nacional.

2 horas semanales

Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat, Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando

Desarrollo

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable), HELENA PARDO (Responsable), CECILIA GOYENOLA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Polímeros y Biomateriales

### **Desarrollo de materiales nanoestructurados de carbono: estructura y propiedades (01/2007 - 01/2009 )**

Este proyecto propone la preparación y desarrollo de materiales nanoestructurados de carbono, conjuntamente con su estudio estructural y físico. La obtención de nanomateriales es de importancia estratégica, no sólo en cuanto al avance hacia el desarrollo de la nanotecnología en el país sino en cuanto al efecto multiplicador que tiene, ya que puede catalizar el surgimiento de nuevas líneas de investigación en otros grupos nacionales. Se propone la producción de fullerenos y nanotubos de carbono por las técnicas de descarga por arco y deposición química de vapor, respectivamente. Posteriormente a la obtención de estos nanomateriales, se trabajará en términos de realizarles modificaciones físicas y químicas. Se someterá a los mismos a la presencia de gases a alta presión y temperatura moderada, buscando la difusión intersticial de los mismos, de forma que se provoquen modificaciones, ya sea por interacción química o por la creación de defectos en los materiales originales. Todos los materiales que se preparen en el marco de este proyecto serán caracterizados física y estructuralmente.

10 horas semanales

Laboratorio de Cristalografía, DETEMA-Facultad de Química UdelaR

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ, L. SUESCUN, HELENA PARDO (Responsable), LUCIANA FERNÁNDEZ, CECILIA GOYENOLA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis, Caracterización y simulación de nuevos materiales

### **DIFRACTÓMETRO DE RAYOS X PARA MATERIALES POLICRISTALINOS, CON FUENTE GENERADORA DE RAYOS X, TUBO SELLADO DE RAYOS X DE RADIACIÓN CUK-ALFA (FOCO FINO), SOFTWARE DE FUNCIONAMIENTO, SISTEMA CERRADO DE REFRIGERACIÓN (01/2007 - 01/2009)**

COMPRA DE DIFRACTÓMETRO DE RAYOS X PARA MATERIALES POLICRISTALINOS, CON FUENTE GENERADORA DE RAYOS X, TUBO SELLADO DE RAYOS X DE RADIACIÓN CUK-ALFA (FOCO FINO), SOFTWARE DE FUNCIONAMIENTO, SISTEMA CERRADO DE REFRIGERACIÓN

5 horas semanales

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , RICARDO FACCIO , HELENA PARDO

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Caracterización Estructural de Materiales Cristalinos

### **DESARROLLO Y CARACTERIZACIÓN DE BIOMATERIALES DE APLICACIÓN ESTRUCTURAL EN REPARACIÓN Y REGENERACIÓN DEL SISTEMA ESQUELÉTICO (01/2007 - 01/2009 )**

El desarrollo y estudio de nuevos materiales ha cobrado trascendencia en los últimos años por sus posibilidades para mejorar propiedades que tengan como consecuencia un más eficiente funcionamiento en las múltiples aplicaciones tecnológicas en las que se puedan utilizar. A nivel médico existe una gran demanda por la utilización de biomateriales para la reparación y aplicación en procesos regenerativos en el sistema esquelético. En la vida moderna, las patologías y traumatismos a ese nivel son una de las grandes causas incapacitantes y que comprometen en mayor medida la calidad de vida de las personas. Los continuos accidentes de tránsito, el aumento de la edad promedio de la población con la consiguiente mayor incidencia de patologías como la osteoporosis, a nivel mundial en general, y con muy especial énfasis en nuestro país, son parámetros que justifican plenamente esta visión. Esta propuesta presenta la fabricación y desarrollo de materiales que por sus propiedades estructurales y de biocompatibilidad pueden tener aplicación en reparación y regeneración de tejidos del sistema esquelético. La propuesta se centrará en la utilización de procesos de calcinación, sinterización y vitrificación y la caracterización a la que se someterá a los materiales obtenidos será estructural, microestructural y física.

2 horas semanales

Facultad de Química , Laboratorio de Cristalografía - Centro NanoMat

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , HELENA PARDO , LUCIANA FERNÁNDEZ , CECILIA GOYENOLA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Biomateriales

### **A quality study of radiosterilized bone-tendon-bone allograft, alter irradiation dose setting, for clinical application by structural, morphological and biomechanical patterns (01/2007 - 01/2009 )**

2 horas semanales

Facultad de Química & Polo Tecnológico de Pando , Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ , HELENA PARDO , INES ÁLVAREZ (Responsable) , HÉCTOR PÉREZ CAMPOS

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Preparación de Biomateriales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Difracción de Rayos X

### **Implementación del Sistema de Tutorías en la Enseñanza de la Física (08/2008 - 12/2008 )**

Implementando este sistema se espera: Ofrecer un tratamiento diferencial para estudiantes con formaciones disímiles. Ofrecer una alternativa globalizadora, teórico-práctica, para estudiantes,

limitados a determinadas franjas horarias Llegar a una población objetivo de estudiantes con alta dificultad en el aprendizaje de la asignatura. Evaluar, desde el punto de vista pedagógico, las mejoras de los resultados en función del incremento en la personalización de la enseñanza

5 horas semanales

Cátedra de Física - DETEMA

Otra

Coordinador o Responsable

Concluido

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , R. LEONE

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Enseñanza de la Física

### **SÍNTESIS Y ESTUDIO DE CARBONO NANOESTRUCTURADO (10/2006 - 09/2008 )**

El objetivo de este proyecto es la síntesis y el estudio estructural y físico de compuestos nanoestructurados. En el mismo se avanzará tanto en el estudio de grafito modificado por operaciones químicas, como en la síntesis y estudio de fullerenos y nanotubos carbonosos. El propósito de este proyecto es fomentar el avance en el estudio de este tipo de compuestos en el marco de la actividad que ya desempeñan los equipos de investigación participantes, con miras de obtener nuevos materiales con propiedades mejoradas, de posible aplicación tecnológica. En tal sentido, se realizarán modificaciones químicas y físicas a las operaciones tradicionales de obtención de este tipo de materiales, como ya se ha hecho en el pasado con el grafito. Los materiales obtenidos serán caracterizados eléctrica y magnéticamente. Además se estudiará su estructura tanto a través de AFM, como de SEM, TEM y difracción de rayos X donde se aplique. Se complementarán los estudios realizados con cálculos teóricos que permitan profundizar en el conocimiento sobre estos materiales.

1 horas semanales

Facultad de Química , Laboratorio de Cristalografía

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , GRACIELA PUNTE , FERNANDO ARAÚJO-MOREIRA (Responsable)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de Nuevos Materiales - Calculos por primeros Principios

### **Diseño, preparación y estudio de materiales avanzados (01/2005 - 12/2007 )**

Se plantea el diseño, preparación y estudio de materiales nanoestructurados con propiedades magnéticas y de conducción de posible interés tecnológico. Los compuestos planteados a estudio son materiales carbonosos y derivados por sustitución química, en particular dopado con boro. Se trata fundamentalmente de materiales grafiticos, hexagonales, en los cuales se busca realizar modificaciones a nivel de micro y nanoestructura a la búsqueda del otorgamiento de propiedades físicas de interés fundamental. Se realizará el estudio de micro y nanoestructura de los materiales obtenidos por microscopía electrónica de barrido, SEM, y por microscopía de fuerza atómica, AFM. Se estudiarán las propiedades de los materiales obtenidos por medidas de propiedades magnéticas susceptometría y magnetometría- y por microscopía de fuerza magnética, MFM.

5 horas semanales

Facultad de Química , Laboratorio de Cristalografía

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Maestría/Magister:1

Doctorado:1

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , HELENA PARDO , FEDERICO RABUFFETTI , INÉS ELUÉN

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

### **Caracterización teórico experimental de fulerenos nanotubos y láminas de grafito sustituidas total o parcialmente con elementos de los grupos IIIA y IVA (01/2006 - 12/2007 )**

La nanotecnología es una de las nuevas disciplinas emergentes en el mundo científico. Esto se debe a que los fulerenos, nanotubos y láminas de grafito presentan un gran abanico de aplicaciones en la industria. Sin embargo, para lograr estos materiales de interés industrial es necesario realizar modificaciones en las estructuras carbonosas antes mencionadas. En este trabajo pensamos emplear la técnica del dopado para diseñar materiales que posean propiedades magnéticas, conductividad eléctrica, resistencia mecánica y propiedades ópticas extraordinarias. La sustitución se realizará empleando los elementos correspondientes a los grupos IIIA y IVA de la tabla periódica, así como también algunos de sus derivados nitrogenados y fosforados como el BN, AlN, GaN, InN, AlP, GaP, InP. Para llevar a cabo este proyecto vamos a emplear en una primera instancia las simulaciones computacionales a nivel de los funcionales de la densidad con el fin de identificar cuales son los materiales que poseen las propiedades fisicoquímicas antes mencionadas. Una vez identificados, se procederá a las síntesis de estos compuestos para confirmar las predicciones teóricas y sus propiedades.

5 horas semanales

Facultad de Química , Laboratorio de Cristalografía

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ , HELENA PARDO , PABLO A. DENIS (Responsable)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica por Primeros Principios

### **Propiedades estruturais e dinâmicas de carboxilatos metálicos (01/2004 - 12/2005 )**

Os carboxilatos de terras raras e metais de transição formam uma grande família de compostos com propriedades interessante tanto para a pesquisa básica como aplicada. Do ponto de vista da pesquisa básica, a grande versatilidade nos arranjos conformacionais dos diferentes grupos moleculares e suas conseqüências na estrutura cristalina e transições de fase é um tópico muito interessante devido à possibilidade de estabelecer modelos para moléculas maiores. Por outro lado, estes sistemas têm sido aplicados em química ambiental, como materiais funcionais e precursores para a síntese de sistemas complexos, entre outras coisas. Devido a isto, a pesquisa de novos materiais desta família e a otimização de suas propriedades é uma condição necessária para obter avanços importantes nas novas aplicações. No entanto, uma pesquisa bem sucedida nesta área só pode ser possível através de um trabalho multidisciplinar, envolvendo pesquisadores com competência em diferentes campos da físico-química do estado sólido. Este projeto visa o trabalho conjunto de grupos de pesquisa com grande experiência em síntese de novos materiais com grupos com ampla trajetória no estudo estrutural e vibracional de diagramas de fase em ciência dos materiais. Assim, os laboratórios de química do estado sólido da Comisión Nacional de Energía Atómica (Argentina), da Universidad Nacional de San Luis (Argentina) e da Universidad de la República (Uruguay), trabalharam na síntese de carboxilatos metálicos e caracterizaram suas propriedades térmicas, magnéticas e microestruturais. Por outro lado, os grupos pertencentes à Universidad Nacional de La Plata (Argentina), ao Instituto de Física de São Carlos (Brasil) e à Universidade Federal do Ceará (Brasil) investigaram a estrutura cristalina e a dinâmica de transições de fase através de difração de raios X e espectroscopia vibracional. Deste modo, o trabalho conjunto destes grupos de pesquisa permitirá estabelecer a correlação entre os métodos de síntese, as propriedades estruturais e as propriedades de interesse tecnológico que facilitará o desenho de novos materiais para aplicações específicas.

5 horas semanales

Facultad de Química , Laboratorio de Cristalografía

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Doctorado:1

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ , ALEJANDRO PEDRO AYALA (Responsable) , ILDE GUEDES DA SILVA , JAVIER ALCIDES ELLENA , GRISELDA NARDA , ELENA VIRGINIA BRUSAU , GRACIELA

PUNTE, GUSTAVO ALBERTO ECHEVERRÍA, GRISELDA POLLA, ANA GABRIELA LEYVA,  
DANIEL ROBERTO VEGA, RICARDO FORTUNATO BAGGIO, HILDA LANZA

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y  
Caracterización de nuevos materiales

#### **Estudio estructural y físico de sistemas grafiticos (10/2002 - 09/2004)**

El objetivo general del Proyecto es mejorar el equipamiento del Laboratorio de Cristalografía y Química del Estado Sólido, para poder realizar el estudio de distintos materiales, en particular de los del sistema propuesto en este Proyecto. Esta mejora de equipamiento no sólo redundará en beneficio del propio Laboratorio sino de la comunidad nacional en formación cuyas disciplinas centrales son química y física de materiales. En forma general, la investigación experimental en el área de Materiales tiene un componente fundamental en la disposición de equipamiento mínimamente adecuado para el estudio de propiedades físicas (por ejemplo conducción eléctrica y magnetismo), sin los cuales se hace muy difícil ser competitivo. Disponer de equipamiento adecuado es fundamental para poder encarar este y otros temas de interés que puedan surgir en el futuro. El objetivo específico es el de investigar la estructura y propiedades físicas de compuestos grafiticos, a través de la sustitución química en  $MgB_2$  y la intercalación de grafito, con el propósito de aportar información química sobre la superconductividad en estos sistemas grafiticos y, eventualmente, hallar nuevos materiales derivados de estas estructuras. Concretamente se estudiarán los sistemas  $M_{1-x}M_gx B_2-yXy$ , con  $M = Li, Ag, Ni, Cu, Zn, Al$  y  $X = C$ , y  $C(\text{grafito})-Y$ , con  $Y = B, S, Ag, Li$ .

5 horas semanales

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:2

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN, ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable), HELENA PARDO,  
RUBEN BEHAK

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y  
Caracterización de nuevos materiales

#### **Talleres de Aprendizaje Activo para la Enseñanza de Física en Facultad de Química (08/2002 - 12/2002)**

Talleres de Aprendizaje Activo para la Enseñanza de Física en Facultad de Química

5 horas semanales

Facultad de Química, Cátedra de Física

Otra

Integrante del Equipo

Concluido

Equipo: ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable), R. LEONE, RUBEN BEHAK

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Enseñanza  
de la Física

#### **Estudio estructural de cerámicos de la serie $La_{1-x}RE_xBaCo_{1-y}Fe_yCuO_{5+d}$ (RE = Pr, Nd) (01/2000 - 12/2002)**

2 horas semanales

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Maestría/Magister:2

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ (Responsable) , HELENA PARDO , SILVIA RUSSI

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de Nuevos Materiales - Cálculos por primeros Principios

## **DIRECCIÓN Y ADMINISTRACIÓN**

### **(01/2008 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía - CaDifraX  
15 horas semanales

### **Co-Responsable de Unidad (04/2008 - 04/2012 )**

Facultad de Química - Polo Tecnológico de Pando, Centro Nano-Mat  
8 horas semanales

## **DOCENCIA**

### **Ingeniería Química (01/2000 - a la fecha)**

Grado

Asignaturas:

Física 101- Mecánica, horas

Física 102 - Electromagnetismo, horas

Física 103 - Laboratorio, horas

Física 104 - Tecnología de Polímeros, horas

### **Bachiller en Química (01/2000 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Física 101- Mecánica, horas

Física 102 - Electromagnetismo, horas

Física 103 - Laboratorio, horas

Física 104 - Tecnología de Polímeros, horas

Cri 01 - Cristalografía, horas

Cri 03 - Física del Estado Sólido, horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

### **Ingeniería de Alimentos (01/2000 - a la fecha)**

Grado

Asignaturas:

Física 101- Mecánica, horas

Física 102 - Electromagnetismo, horas

Física 103 - Laboratorio, horas

### **Química Farmacéutica (01/2000 - a la fecha)**

Grado

Asignaturas:

Física 101- Mecánica, horas

Física 102 - Electromagnetismo, horas

Física 103 - Laboratorio, horas

### **Bioquímica Clínica (01/2000 - a la fecha)**

Grado

Asignaturas:

Física 102 - Electromagnetismo, horas

Física 103 - Laboratorio, horas

Física 104 - Tecnología de Polímeros, horas  
Cri 01 - Cristalografía, horas  
Física 101- Mecánica, 6 horas, Teórico-Práctico

**Química (01/2000 - a la fecha)**

Grado

Asignaturas:

Física 101- Mecánica, horas  
Física 102 - Electromagnetismo, horas  
Física 103 - Laboratorio, horas  
Física 104 - Tecnología de Polímeros, horas  
Cri 01 - Cristalografía, horas  
Cri 03 - Física del Estado Sólido, horas

**Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (01/2005 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Cri 03 - Física del Estado Sólido - Encargado del curso desde el año 2005, horas  
Cri 01 - Cristalografía - Encargado del curso desde el año 2007, horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**Doctorado en Química (08/2015 - a la fecha)**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Microscopia Raman Confocal Aplicada a la Caracterización de Materiales, 40 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**Diploma de Especialista en Farmacia Industrial (DEFI) (10/2015 - a la fecha)**

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Herramientas para el desarrollo de productos farmacéuticos: Difracción de rayos X y Microscopía Raman aplicada a la industria química, 20 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**Doctorado en Química (11/2015 - 11/2015)**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

Nuevos antihelmínticos: aspectos farmacológicos, sintéticos y tecnológicos, 20 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**(10/2013 - 10/2013)**

Especialización

Responsable

Asignaturas:

Difracción de Rayos y el Polimorfismo en Fármacos, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Polimorfismo en Fármacos

**cursos de posgrado (08/2012 - 08/2012 )**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Simetría y Cristalografía, 40 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Cristalografía

 **cursos de posgrado (05/2010 - 05/2010 )**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Métodos de Simulación de Estructura Electrónica en Materiales Nanoestructurados, 40 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología, DFT

 **cursos de posgrado (04/2010 - 04/2010 )**

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Microscopía de Fuerza Atómica aplicada a la investigación en Ciencias Biológicas, Biomédicas, Química y Física, 30 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Nanotecnología

 **cursos de posgrado (10/2009 - 10/2009 )**

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

Bases de la nanociencia, 30 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Nanotecnología

 **Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (08/2009 - 08/2009 )**

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Método de Preparación y Caracterización de Nanomateriales Cerámicos, 30 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / cristalografía, materiales, y nanotecnología

 **Ingeniería Química (09/2007 - 09/2007 )**

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Elementos de Química y Física del Estado Sólido Aplicado a la Corrosión, horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas /

 **EXTENSIÓN** **Preparación de Piel Artificial. Proyecto Financiado por el llamado "Inclusión Social" de CSIC-UdelaR (10/2008 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat

1 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Polímeros, Biomateriales

**Participación en curso Nanotecnología y Sociedad (04/2009 - 04/2009 )**

Facultad de Química, Cátedra de Física

4 horas

Áreas de conocimiento:

Humanidades / Otras Humanidades / Otras Humanidades / Ciencia

**SERVICIO TÉCNICO ESPECIALIZADO**

**(01/2005 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía - CaDifraX

10 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Caracterización cristalográfica de principios activos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Control de Calidad de materias primas farmacéuticas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Análisis Cuantitativos y Cualitativos de muestras complejas

**(01/2005 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía - CaDifraX

10 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Difracción de Rayos X de Polvo

**(01/2005 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía - CaDifraX

10 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Difracción de Rayos X de Polvo

**Servicio de Análisis por Difracción de Rayos X y Microscopía Raman Confocal (09/2005 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía - CaDifraX

10 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Difracción de Rayos X de Polvo

**PASANTÍAS**

**(11/2015 - 11/2015 )**

Universidad Nacional de La Plata, Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electronicos - GEMyDE - del D

20 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**(08/2006 - 09/2006 )**

Argonne National Laboratory - Advance Photon Source - Chicago - USA, Materials Science Division

10 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

**Estación XAFS (D04B - XAS1) (07/2004 - 07/2004 )**

Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron - Brasil, Estación XAFS (D04B - XAS1)

12 horas semanales

Áreas de conocimiento:

## **OTRA ACTIVIDAD TÉCNICO-CIENTÍFICA RELEVANTE**

### **Caracterización de cuali y cuantitativa de mezclas cristalinas por Difracción de Rayos X (01/2001 - a la fecha )**

Facultad de Química, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales & Centro NanoMat  
2 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cristalografía, Difracción de Rayos X en polvo

## **GESTIÓN ACADÉMICA**

### **Responsable del Área Física del DETEMA (11/2018 - a la fecha )**

DETEMA, Física

Gestión de la Enseñanza 20 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas /

### **Integrante de la Comisión Nacional de Evaluación Científica y Técnica (CNECT) (Ley número 19.585) ? Prohibición del uso del procedimiento de fractura hidráulica (fracking) para la explotación de hidrocarburos no convencionales? representante Titular de la (11/2018 - a la fecha )**

Academia Nacional de Ciencias del Uruguay, Academia Nacional de Ciencias del Uruguay

Participación en cogobierno 2 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

### **Director de Departamento DETEMA (12/2021 - a la fecha )**

DETEMA (Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones), Área Física

Participación en cogobierno 20 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

### **Titular Orden docente (01/2007 - a la fecha )**

Facultad de Química, Comisión de Seguimiento de la carrera Ingeniería Química.

Participación en cogobierno 2 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

### **Delegado Titular orden docente (08/2006 - a la fecha )**

Facultad de Química, Comisión de Carrera Ing. Química.

Participación en cogobierno 2 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

### **Comisión Re-evaluación Acreditación de Carrera Ingeniería Química (05/2010 - a la fecha )**

Facultad de Química, DETEMA

Gestión de la Enseñanza

### **Integrante de Directiva de Departamento. Representante G3, G4 y G5, 2013 (04/2013 - a la fecha )**

Facultad de Química - Universidad de la República, DETEMA

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

### **Director Titular de Departamento DETEMA (12/2021 - a la fecha )**

Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones

(DETEMA) Participación en consejos y comisiones 20 horas semanales  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

**Delegado Suplente al Consejo de la Facultad de Química (01/2015 - 01/2018 )**

Facultad de Química - Universidad de la República  
Participación en consejos y comisiones

**Titular por el Orden Docente (01/2007 - 01/2015 )**

Comisión de Ahorro y Eficiencia Energética.  
Participación en cogobierno

**En representación del Área Ciencias y Tecnologías. Suplente (08/2006 - 01/2015 )**

Comisión de Descentralización,  
Participación en cogobierno

**Delegado Suplente (08/2007 - 01/2015 )**

Sub Comisión de Educación Tecnológica Terciaria, Comisión dependiente del CDC  
Participación en cogobierno

**Delegado Orden Docente (09/2008 - 01/2015 )**

Comité de Seguimiento del Convenio con FQ - ANCAP, Facultad de Química  
Gestión de la Investigación

**Delegado Titular por el orden docente (01/2006 - 12/2011 )**

Asamblea del Claustro de la Facultad de Química  
Participación en cogobierno

**Comisión Asesora (05/2007 - 05/2011 )**

Cuadro Interinos Ayudante Grupo de Física - DETEMA, Facultad de Química  
Participación en consejos y comisiones

**Presidente del Claustro, delegado Orden Docente (01/2008 - 05/2011 )**

Asamblea del Claustro de la Facultad de Química  
Participación en cogobierno

**Comisión Asesora (05/2008 - 05/2011 )**

Cuadro de Ayudantes del Taller de Instrumentos-DETEMA, Facultad de Química  
Participación en consejos y comisiones

**Comisión Asesora (05/2008 - 05/2011 )**

Cuadro Ayudantes Cristalografía-DETEMA, Fac. de Química  
Participación en consejos y comisiones

**Integración de Tribunal de Concurso para provisión definitiva de un cargo de Asistente del Centro de actividades integradas en ciencia y tecnología de los materiales y su aplicación en el medio ambiente (06/2010 - 09/2010 )**

Facultad de Química, DETEMA  
Participación en consejos y comisiones

**Orden docente titular (08/2004 - 08/2010 )**

Facultad de Química, Comisión de Seguimiento de la carrera Tecnólogo Químico.  
Participación en cogobierno  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

**Titular por el orden docente (01/2007 - 01/2009 )**

Comisión de Reglamentos  
Participación en cogobierno

**Instrumentación de la 1º y 2º, pruebas evaluatorias Plan de Estudios 2000, Delegado Docente al Grupo**

**de Trabajo (07/2008 - 12/2008 )**

Instrumentación de la 1° y 2°, pruebas evaluatorias Plan de Estudios 2000, Fac. de Química  
Participación en cogobierno

**Hacia la formulación de una carrera docente en la UdelaR, Delegado Docente al Grupo de Trabajo (07/2008 - 09/2008 )**

Hacia la formulación de una carrera docente en la UdelaR  
Participación en cogobierno

**Representante de Estudiantes de Posgrado (04/2007 - 04/2007 )**

Integrante Comisión de becas de Doctorado y Posgrado, PEDECIBA-Química

**Delegado Docente al Grupo de Trabajo (09/2006 - 10/2006 )**

Redacción de un Reglamento de Exámenes actualizado, Facultad de Química  
Participación en cogobierno

**Suplente por el orden docente (01/2004 - 12/2005 )**

Asamblea del Claustro de la Facultad de Química  
Participación en cogobierno 20 horas semanales  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

**SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY**

Área Química (PEDECIBA)

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN****Otro (11/2020 - a la fecha)** Trabajo relevante

Investigador Honorario, Grado 5 2 horas semanales

**Otro (02/2015 - 11/2020)**

Investigador Honorario, Grado 4 2 horas semanales  
Investigador Área Química

**Otro (02/2008 - 02/2015)**

Investigador Grado 3 2 horas semanales  
Área Química

**ACTIVIDADES****DIRECCIÓN Y ADMINISTRACIÓN****Coordinador del Área Química del PEDECIBA (02/2017 - 02/2021 )**

PEDECIBA Química, PEDECIBA Química  
10 horas semanales

**GESTIÓN ACADÉMICA****Integrante Consejo Científico del Área y Coordinador (06/2017 - 02/2021 )**

PEDECIBA Química  
Gestión de la Investigación  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica /

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Universidad Nacional de La Plata

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### **Profesor visitante (12/2016 - 12/2016)**

Profesor Titular 40 horas semanales / Dedicación total  
Profesor Visitante del D

### **Profesor visitante (10/2012 - 10/2012)**

40 horas semanales  
Dictado del Curso "Simulación de Nanomateriales"

## **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Universidad Nacional del Comahue

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### **Profesor visitante (07/2012 - 07/2012)**

40 horas semanales  
Dictado del Curso de Posgrado "Simetría y Cristalografía" para posgrado en Física

## **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA**

Universidad Autonoma de Barcelona

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### **Otro (05/2011 - 05/2011)**

Estancia de investigación 40 horas semanales  
Estancia de Investigación en el Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, financiado en el marco de Actividades del proyecto EULASUR

## **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Universidad Nacional del Sur

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### **Profesor visitante (04/2011 - 04/2011)**

Programa de Apoyo a Graduados 40 horas semanales  
Dictado del Curso de Posgrado "Calculo de Estructura Electrónica de Materiales Nanoestructurados" financiado por Programa de Apoyo a Graduados de la Secretaría General de Ciencia y Tecnología

## **CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: 20 horas  
Carga horaria de investigación: 15 horas  
Carga horaria de formación RRHH: 15 horas  
Carga horaria de extensión: 2 horas  
Carga horaria de gestión: 8 horas

## **Producción científica/tecnológica**

La actividad de investigación se desarrolla en Ciencia de Materiales, en particular en Nanotecnología con abordaje mixto teórico-experimental. En particular las líneas de investigación se enfocan en el trabajo con nanomateriales de carbono y nanomateriales para energía. En el primer caso se trabaja en el entendimiento del rol de defectos y dopantes en grafeno, nanocintas de grafeno, nanotubos y fullerenos. Se pone especial interés en las propiedades electrónicas: magnetismo, transporte electrónico y ópticas. Este trabajo se realiza con colaboración con grupos de investigación regionales y también extra-regionales. Gracias a este trabajo se esta incursionando también en el área de la Electrónica Molecular, apoyando con simulación a grupos

experimentales de Alemania y Brasil (por ejemplo: Nature:Sci.Rep.(2015)).

En energía se estudian nanoestructuras de TiO<sub>2</sub> para su uso en celdas solares. Se trabaja también en la preparación de nanomateriales para almacenamiento de energías basados en ión-litio, recibiendo dos proyectos ANII-FSE para esta temática. Se han preparado y se están modelando materiales como potenciales electrolito sólidos y titanatos varios, y más recientemente la preparación de nanopartículas para cátodos de ion-Li basados en LiFePO<sub>4</sub>. Así se han publicado los 14 primeros trabajos del país en materiales para baterías de ion-litio, y esperamos su consolidación el corto plazo. Este trabajo ha justificado la adquisición del primer Microscopio- Raman-Confocal del país con Fuerza-Atómica, todo como responsable científico gracias a financiación de ANII (EQC y FSE). En el año 2019 se ha logrado el apoyo de CSIC para la adquisición de un difractor de polvo. Se ha puesto mucho énfasis en la generación de capacidades materiales y humanas para el trabajo en ciencias de materiales. Por ello se ha trabajado fuertemente en la realización de cursos de grado, posgrado y de especialización para difundir las técnicas/equipos y lograr su integración a otras áreas. Ejemplo de ello es la actual co-dirección de tesis de posgrado en química, una con el grupo de Farmacología-FQ y otra con el grupo de Microbiología-FQ, aportando la caracterización químico-física de formulaciones de fármacos y de interacción con nanopartículas metálicas respectivamente.

De todas formas lo más relevante es el énfasis en la formación de RRHH. En este marco, y a nivel local, se dirigieron 2 tesis de Doctorado en Química, 2 proyectos de postdoctorado y tres tesinas de Licenciatura en Química. Se sigue con la dirección de 6 tesis Doctorado en Química (que han realizado todas pasaje desde Posgrado), 2 tesis de Doctorado en Física (1 en Uruguay y otra en Argentina), 2 proyectos de postdoctorado (Argentina); todas ellas vinculadas al diseño, caracterización y simulación de materiales con aplicaciones en energía.

Todo este trabajo ha dado lugar a lo largo de este tiempo a la publicación de 155 artículos, 106 trabajos en congresos y 31 presentaciones orales. De los trabajos publicados se es autor de correspondencia en un 36% de los casos, siendo el promedio de autoría de correspondencia superior al 50% desde el año 2016. Se ha trabajado como revisor de artículos para 104 revistas de circulación internacional, revisando más de 500 trabajos.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

##### **The lithiation mechanism of ultrathin 2D ZnO systems working as anode materials for lithium-ion batteries: From Wurtzite to graphene-like structures ? (Completo, 2024)**

F. Pignanelli, M. ROMERO, FACCI, R., MOMBRÚ, A W

Surfaces and Interfaces, v.: 46 p.:10399 2024

Palabras clave: graphene like ZnO ionin-electronic transport DFT Lithiation Lithium batteries

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanoenergía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 24680230

DOI: [10.1016/j.surfin.2024.103997](https://doi.org/10.1016/j.surfin.2024.103997)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2468023024001561>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

##### **Biogenic Silver and Copper Nanoparticles: Potential Antifungal Agents in Rice and Wheat Crops (Completo, 2023)**

Sanguineto, P., FACCI, R., ALBORÉS, S., ABREO, E.

Chemistry, 2023

Palabras clave: biogenic nanoparticles Trichoderma antifungal phytopathogens Raman

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología y Microbiología

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 26248549

**Structural phases of sodium titanate nanotubes obtained in different synthesis conditions: a theoretical study (Completo, 2023)**

AMY L. / AMY L. I., S FAVRE, Lucia Campo, FACCIO, R.

MRS Advances, 2023

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 20598521

**On the donor:acceptor features for poly(3-hexylthiophene):TiO<sub>2</sub> quantum dots hybrid materials obtained via water vapor flow assisted sol-gel growth (Completo, 2023)**

MOMBRÚ, D, M. ROMERO, FACCIO, R., MOMBRÚ, A W

Polymers, 2023

Palabras clave: Quantum dots p3ht

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 20734360

Scopus<sup>®</sup>

**Temperature cycling effect on structural, optical and electrical properties of nanostructured sodium titanates (Completo, 2023)**

AMY L. / AMY L. I., Lucia Favre, FACCIO, R.

Ceramics International, 2023

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales: materiales para energía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 02728842

Scopus<sup>®</sup>

**Biogas dry reforming over Ni-La-Ti catalysts for synthesis gas production: Effects of preparation method and biogas composition on catalytic activity and stability (Completo, 2023)**

VEIGA S., M. ROMERO, FACCIO, R., Dario Segobia, Carlos Apesteuguía, Ana Laura Pérez, Carlos Dante Brondino, BUSSI, J.

Fuel, v.: 346 p.:12830 2023

Palabras clave: biogas syngas nickel catalysts dry reforming

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Energía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00162361

DOI: [10.1016/j.fuel.2023.128300](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.128300)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236123009134>

Scopus<sup>®</sup>

**Vibrational Properties of Metastable Orthorhombic Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> (Completo, 2023)**

Paloma B. Souza, Milton A. Tumelero, FACCIO, R., Rasin Ahmed, Cristiani C. Plá Cid, Giovanni Zangari, Andre A. Pasa

Physical Chemistry Chemical Physics, 2023

Palabras clave: Raman Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> vibrational Properties

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Simulación Computacional

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

Scopus<sup>®</sup>

**Study and formulation of microemulsions for the synthesis of Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Ag nanoparticles:**

**Characterization and Evaluation of Antimicrobial Activity (Completo, 2023)**

FACCIO, R., ROSSANNIE MARIA GUASAMUCARE ORTIZ, L. ARIZAGA, MIRABALLES-MARTÍNEZ, I., ALBORÉS, S., Juan Pereira  
MRS Advances, 2023  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 20598521

**Discovering atomistic pathways for supply of metal atoms to graphene surface from methyl-based precursors (Completo, 2023)**

Davide G. Sangiovanni, FACCIO, R., Gueorgui K. Gueorguiev, Anelia Kakanakova  
Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 25 p.:829 - 837, 2023  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas / Electronic Structure and Nanotechnology  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 14639076  
E-ISSN: 14639084  
DOI: [10.1039/D2CP04091C](https://doi.org/10.1039/D2CP04091C)  
<https://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2022/CP/D2CP04091C>

Scopus<sup>®</sup>

**Ab-initio study of vacancy-defective aluminium nitride nanosheets as trifluoroacetonitrile gas sensor (Completo, 2023)**

A.J. González FÁ, Romina Luna, J.M. Marchetti, FACCIO, R., I. López-Corral  
Applied Surface Science, v.: 612 p.:15580 2023  
Palabras clave: sensors aluminium nitride DFT nanosheets  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Simulación Computacional  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 01694332  
DOI: [10.1016/j.apsusc.2022.155803](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.155803)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433222033311>

Scopus<sup>®</sup>

**Development of triamcinolone acetonide nanocrystals for ocular administration (Completo, 2023)**

María Lina Formica, Hamoudi Ghassan Awde, Alejandro Javier Paredes, MELIAN E., Nahuel Matías Camacho, FACCIO, R., Luis Ignacio Tártara, Santiago Daniel Palma  
Pharmaceutics, v.: 15 2, p.:683 - 683, 2023  
Palabras clave: Triamcinolone acetonide nanocrystals ocular inflammation corticosteroids media milling  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Tecnología Farmacéutica  
Medio de divulgación: Internet  
E-ISSN: 19994923  
DOI: [10.3390/pharmaceutics15020683](https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15020683)  
<https://www.mdpi.com/1999-4923/15/2/683>

Scopus<sup>®</sup>

**Structure and size-dependent vibrational and thermal properties of Ni clusters: a systematic ab initio approach (Completo, 2023)**

Maldonado, A., FACCIO, R., Ramos, S. B.  
Journal of Molecular Graphics and Modelling, v.: 121 p.:10844 - 10844, 2023  
Palabras clave: ab initio calculations transition metal clusters phonons thermodynamic properties.  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Computational Materials Sciences: Nanotechnology  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 10933263  
DOI: [10.1016/j.jmgm.2023.108445](https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2023.108445)

**A Potential Boron Neutron Capture Therapy Agent Selectively Suppresses High-Grade Glioma: In Vitro and in Vivo Exploration (Completo, 2023)**

Catalina Alamón , Dávila, B., Maria Garcia , Susana Nievas , María Dagrosa , Silvia Thorp , Mariángeles Kovacs , Emiliano Trias , FACCIO, R. , Martín Gabay , Nidal Zeineh , Abraham Weizman , Francesc Teixidor , Clara Viñas , Moshe Gavish , CERECETTO, H. , M. COUTO  
Molecular Pharmaceutics, v.: 20 5 , p.:2702 - 2713, 2023

Palabras clave: epidermal growth factor receptors glioblastoma boron neutron capture therapy Raman Microscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Medicinal Chemistry

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 15438384

E-ISSN: 15438392

DOI: [10.1021/acs.molpharmaceut.3c00152](https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.3c00152)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.molpharmaceut.3c00152>

Scopus

**Multifunctional organometallic compounds for the treatment of Chagas Disease: Re(I) tricarbonyl compounds with two different bioactive ligands (Completo, 2023)**

Mariano Soba , G.Scalese , F.Casuriaga , Nicolás Pérez , NICOLÁS VEIGA , Gustavo A. Echeverría , Oscar E. Piro , FACCIO, R. , PEREZ-DIAZ, L , Gilles Gasser , I. MACHADO , GAMBINO, D.  
Dalton Transactions, v.: 52 6 , p.:1623 - 1641, 2023

Palabras clave: Chagas disease clotrimazole metals in medicine multifunctional metal compounds Re(I) complexes Trypanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química

Inorgánica y Química medicinal

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 14779226

E-ISSN: 14779234

DOI: [10.1039/D2DT03869B](https://doi.org/10.1039/D2DT03869B)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/dt/d2dt03869b>

Scopus

**Mixed ionic-electronic transport for PEDOT:PSS-based zero-gated organic electrochemical transistors using impedance spectroscopy and micro-Raman imaging (Completo, 2023)**

M. ROMERO , MOMBRÚ, D. , F. Pignanelli , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W  
ACS Applied Electronic Materials, 2023

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 26376113

**Barium Fluoroborate glasses doped with Er<sup>3+</sup>: structural and optical studies (Completo, 2023)**

Roth, G. , Ricardo Costa Santana , FACCIO, R. , H. BENTOS PEREIRA , M. RODRIGUEZ  
MRS Advances, 2023

Palabras clave: Fluoroborate glasses

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas / Ciencia de Materiales

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 20598521

**Insights on the relevance of DFT+U formalism for strongly correlated Ta-d electrons probing the nanoscale in oxides: Combined ab initio and TDPAC study in 181Hf(->181Ta)-implanted  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> single-crystal (Completo, 2023)**

G. N. Darriba , FACCIO, R. , P.-D. Eversheim , M. Rentería

Physical Review B, 2023

Palabras clave: TDPAC Hf Ta DFT+U

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 10980121

E-ISSN: 1550235X

**Optical and Electronic Properties of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles and Na<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.H<sub>2</sub>O Nanotubes Doped with Transition Metals (Fe, Cu, Ni): An Experimental Study and DFT Modeling (Completo, 2023)**

Martin Esteves, FERNÁNDEZ-WERNER, L., AMY L. / AMY L. I., RICARDO E. MAROTTI, , FACCIO, R., MOMBRÚ, A W

The Journal of Physical Chemistry C, 2023

Palabras clave: TiO<sub>2</sub> Optical properties nanoparticles solar cells DSSC nanotubes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas / Ciencia de materiales y Nanotecnología: estructura electrónica.

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

Scopus

**The structural, optical and electrical properties of sodium titanate nanotubes sensitized with nitrogen/sulfur co-doped graphene quantum dots as potential materials for quantum dots sensitized solar cells (Completo, 2023)**

Martin Esteves, MOMBRÚ, D, M. ROMERO, FERNÁNDEZ-WERNER, L., FACCIO, R., MOMBRÚ, A W

Materials Today Electronics, v.: 3 p.:10002 - 10002, 2023

Palabras clave: solar cells titanate nanotube quantum dots optical properties

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Energía Solar

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanomateriales para Energía

Medio de divulgación: Otros

Escrito por invitación

ISSN: 27729494

DOI: [10.1016/j.mtelec.2023.100029](https://doi.org/10.1016/j.mtelec.2023.100029)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2772949423000050>

**Strain effect on the high T<sub>c</sub> superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>: an ab initio study comparing bulk and monolayer models (Completo, 2023)**

C. Yelpo, S FAVRE, D. ARIOSA, FACCIO, R.

Electronic Structure, v.: 5 4, p.:1500 2023

Palabras clave: HTSC strain effect ab initio calculation vibrational properties electronic properties

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Computational Materials Science

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 25161075

DOI: [10.1088/2516-1075/acbff9](https://doi.org/10.1088/2516-1075/acbff9)

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2516-1075/acbff9>

WEB OF SCIENCE™

**CO<sub>2</sub> activation and dissociation over Ag(111) surfaces in the presence of surface charge density: A static gas phase DFT study (Completo, 2023)**

Mario G. Sandoval, Jaspreet Walia, Mohamed S. E. Houache, Yaser Abu-Lebdeh, Patrick H.J. Mercier, Pierre Berini, FACCIO, R., Arnaud Weck

Applied Surface Science, v.: 610 p.:15549 2023

Palabras clave: Silver hot electrons plasmon CO<sub>2</sub>

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2022.155498](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.155498)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433222030264>

Scopus

**Li intercalation, electronic and thermodynamic properties in H<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>7</sub> bulk: A theoretical study (Completo, 2023)**

Julian Juan , FERNÁNDEZ-WERNER, L. , Pablo Bechthold , Paula Jasen , FACCIO, R. , Estela Gonzalez

Computational Materials Science, v.: 228 p.:11234 - 11234, 2023

Palabras clave: H<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>7</sub> DFT Intercalation Thermodynamics Lithium

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Estructura Electrónica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Energía

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09270256

DOI: [10.1016/j.commatsci.2023.112344](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112344)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025623003385>

Scopus

**Evidence of Graphene-like ZnO Nanostructures Via Zinc Dimethoxide Hydrolysis-condensation Under Ambient Conditions on Au(111) Surface Using SERS: Simulation and Experiment" (Completo, 2023)**

M. ROMERO , F. Pignanelli, MOMBRÚ, D , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 127 1 , p.:429 - 436, 2023

Palabras clave: 2D ZnO SERS graphene-like ZnO

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.2c07409](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c07409)

<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.jpcc.2c07409>

Scopus

**Electronic properties of L-tryptophan adsorbed on Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> (T=O) MXenes (Completo, 2023)**

FERNÁNDEZ-WERNER, L. , Martín Esteves, AMY L. / AMY L. I. , M. KIENINGER , VENTURA, O.N. , FACCIO, R.

MRS Advances, 2023

Palabras clave: Mxenes Tryptophan

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Estructura electrónica y nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 20598521

**A theoretical exploration of catechol sensitization of C-doped bronze TiO<sub>2</sub> surfaces for photochemical systems (Completo, 2023)**

Herman Heffner , Jorge M. Marchetti , FACCIO, R. , Ignacio López-Corral

Computational Materials Science, 2023

Palabras clave: TiO<sub>2</sub>(B) Carbon doping Adsorption energy DFT Ultrathin sheets

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanomateriales para energía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09270256

Scopus

**Correction: Discovering atomistic pathways for supply of metal atoms from methyl-based precursors to graphene surface (Reseña, 2023)**

Davide G. Sangiovanni , FACCIO, R. , Gueorgui Kostov Gueorguiev , Anelia Kakanakova-Georgieva  
Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 25 p.:5887 - 5887, 2023

Palabras clave: graphene methyl-based precursor ab initio molecular dynamics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Electronic Structure

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

DOI: [10.1039/D3CP90046K](https://doi.org/10.1039/D3CP90046K)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/cp/d3cp90046k>

Scopus\*

**A NOVEL DFT STUDY OF QUANTUM CAPACITY AND ELECTRONIC STRUCTURE OF 2D MATERIALS FOR LI-ION BATTERIES (Completo, 2022)**

Julian Juan , Pablo Bechthold , Maria J. Jiménez , Francisco Gaztañaga , Graciela P. Brizuela , Paula V. Jasen , FACCIO, R. , Estela A. González

Mecánica Computacional, v.: XXXIX p.:1297 - 1306, 2022

Palabras clave: DFT Quantum Capacity Electronic Structure +

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas / Estructura Electrónica y Nanotecnología

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Argentina

E-ISSN: 25913522

<http://www.amcaonline.org.ar>

**Impact of the crystal size of beta zeolite on the structural quality of zeolite templated carbons (Completo, 2022)**

Thibaud Aumond , Martin Esteves , Yannick Pouilloux , FACCIO, R. , Alexander Sachse

Microporous and Mesoporous Materials, v.: 331 p.:11164 - 11164, 2022

Palabras clave: Zeolite templated carbon beta zeolite crystal size XRD simulation

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 13871811

DOI: [10.1016/j.micromeso.2021.111644](https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.111644)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387181121007708>

Scopus\*

**Electronic Structure Properties of Boron-doped and Carbon-Boron-codoped TiO<sub>2</sub>(B) for Photocatalytic applications (Completo, 2022)**

Herman Heffner , FACCIO, R. , Ignacio López-Corral

Journal of Physics and Chemistry of Solids, v.: 165 p.:11068 2022

Palabras clave: TiO<sub>2</sub>(B) carbon doping boron doping density functional theory codoping

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00223697

DOI: [10.1016/j.jpics.2022.110685](https://doi.org/10.1016/j.jpics.2022.110685)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022369722001135?via%3Dihub>

Scopus\*

**Ab-initio molecular dynamics assessment on the mixed ionic-electronic transport for crystalline poly(3-hexylthiophene) using full explicit lithium-based dopant and additives (Completo, 2022)**

MOMBRÚ, D , M. ROMERO , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

Macromolecules, v.: 55 1 , p.:113 - 124, 2022

Palabras clave: ionic-electronic dopant organic semiconductor ab-initio molecular dynamics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Simulación Computacional

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00249297

E-ISSN: 15205835

DOI: [10.1021/acs.macromol.1c02009](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02009)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.macromol.1c02009>

Scopus<sup>®</sup>

**A density functional evaluation of catechol adsorption on pristine and reduced TiO<sub>2</sub>(B) (100) ultrathin sheets for dye-sensitized solar cell applications (Completo, 2022)**

Herman Heffner , Jorge Mario Marchetti , FACCIO, R. , Ignacio Lopez-Corral

Inorganic Chemistry, v.: 61 48 , p.:19248 - 19260, 2022

Palabras clave: TiO<sub>2</sub>(B) Oxygen vacancies Formation energy Surface equivalent energy DFT

Ultrathin sheets Adsorption energy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00201669

E-ISSN: 1520510X

DOI: [10.1021/acs.inorgchem.2c02933](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c02933)

<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.inorgchem.2c02933>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**T908 polymeric micelles improved the uptake of Sgc8-c aptamer-probe in bearing tumor mice: A co-association study between the probe and preformed nanostructures (Completo, 2022)**

Romina Castelli , IBARRA M , FACCIO, R. , MIRABALLES-MARTÍNEZ, I. , FERNÁNDEZ

PAVLOVICH, MARCELO , Albertina Moglioni , P. CABRAL , CERECETTO, H. , Romina Glisoni , VICTORIA CALZADA

Pharmaceuticals, v.: 15 1 , p.:1 - 20, 2022

Palabras clave: Sgc8-c aptamer probe polymeric micelles liposomes active targeting

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Liposomas

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 14248247

DOI: [10.3390/ph15010015](https://doi.org/10.3390/ph15010015)

<https://www.mdpi.com/1424-8247/15/1/15/pdf>

Scopus<sup>®</sup>

**High performance Ni-catalysts supported on rare-earth zirconates (La and Y) for hydrogen production through ethanol steam reforming. Characterization and assay (Completo, 2022)**

MUSSO M. , Alejandra Cardozo , M. ROMERO , FACCIO, R. , Darío Segobia , Carlos Apesteguía , BUSSI, J.

Catalysis Today, v.: 394-396 p.:524 - 538, 2022

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Producción de Hidrógeno y Catálisis

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09205861

DOI: [10.1016/j.cattod.2021.07.001](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2021.07.001)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0920586121003011>

Scopus<sup>®</sup>

**Improving the in vitro dissolution rate and pharmacokinetic performance of fenbendazole in sheep using drug nanocrystals (Completo, 2022)**

MELIAN E. , IBARRA M , Laura Ceballos , Alejandro J. Paredes , MUNGUÍA B. , FACCIO, R. , Santiago Palma , Luis Ignacio Álvarez , DOMÍNGUEZ , L

Research in Veterinary Science, v.: 142 p.:110 - 116, 2022

Palabras clave: Fenbendazole nanocrystals population pharmacokinetics dissolution rate bioavailability sheep

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanoformulaciones  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 00345288  
DOI: [10.1016/j.rvsc.2021.12.001](https://doi.org/10.1016/j.rvsc.2021.12.001)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034528821003453>

Scopus<sup>®</sup>

**The non-direct band gap in borate glasses; a brief discussion on analysis methodologies and its interpretation (Completo, 2022)**

Mauricio Rodriguez , FACCIO, R. , H. BENTOS PEREIRA , RICARDO E. MAROTTI,  
Optical Materials, v.: 123 p.:11189 2022  
Palabras clave: borate glasses band gat DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09253467  
DOI: [10.1016/j.optmat.2021.111890](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111890)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925346721010909>

Scopus<sup>®</sup>

**The role of amorphous and crystalline regions on the optical and electronic properties for poly(3-hexylthiophene) with embedded nitrogen/sulfur-doped graphene quantum dots as donor:acceptor systems (Completo, 2022)**

MOMBRÚ, D , M. ROMERO , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W  
Polymer Journal, v.: 54 p.:1465 - 1476, 2022  
Palabras clave: poly(3-hexylthiophene) graphene quantum dots molecular dynamics amorphous crystalline  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Polímeros y Nanotecnología  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales y Nanotecnología Computacional  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 00323896  
E-ISSN: 13490540  
DOI: [10.1038/s41428-022-00694-0](https://doi.org/10.1038/s41428-022-00694-0)  
<https://www.nature.com/articles/s41428-022-00694-0>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Substrate and thickness influence on YBa2Cu3O7-d thin films grown by PLD deposition. (Completo, 2022)**

M. MAZINI , D. ARIOSIA , S FAVRE , FACCIO, R.  
Applied Physics A, v.: 128 p.:1111 2022  
Palabras clave: HTS Thin Films Epitaxial strain PLD deposition size and strain effect  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09478396  
E-ISSN: 14320630  
DOI: [10.1007/s00339-022-06202-8](https://doi.org/10.1007/s00339-022-06202-8)  
<https://link.springer.com/article/10.1007/s00339-022-06202-8>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Structural, optical, and electrical properties of proton intercalation? H<sup>+</sup>/Na<sup>+</sup> phases in nanostructured titanates induced by pH during hydrothermal synthesis (Completo, 2022)**

AMY L. / AMY L. I. , S FAVRE , FACCIO, R.  
Materials Today Communications, v.: 33 p.:10490 2022  
Palabras clave: sodium titanates nanotubes optical response proton intercalation  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Energía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 23524928

DOI: [10.1016/j.mtcomm.2022.104908](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.104908)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2352492822017494>

Scopus<sup>®</sup>

**Hydrogen Titanate H<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> Nanowires Derived from K<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> as Potential Materials for Solar Cell Applications: A Theoretical Study (Completo, 2022)**

Martin Esteves, FERNÁNDEZ-WERNER, L., Pablo Bechthold, FACCIIO, R., MOMBRÚ, A W  
ChemistrySelect, v.: 7 29, p.:1824 2022

Palabras clave: DFT hydrogen titanate nanowires optical properties solar cells

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Simulación Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Energía: Celdas Solares

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 23656549

DOI: [10.1002/slct.202201824](https://doi.org/10.1002/slct.202201824)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/slct.202201824>

Scopus<sup>®</sup>

**Hybrid organic-inorganic materials and interfaces with mixed ionic-electronic transport properties: advances in experimental and theoretical approaches (Completo, 2022)**

M. ROMERO, MOMBRÚ, D., F. Pignanelli, FACCIIO, R., MOMBRÚ, A W

Frontiers in Chemistry, v.: 10 p.:89201 2022

Palabras clave: organic- inorganic hybrid Mixed ionic and electronic conducting Sol-gel - alkoxide route computational modeling Polymer nano composite

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Litio, electrolitos

Medio de divulgación: Otros

Escrito por invitación

E-ISSN: 22962646

DOI: [10.3389/fchem.2022.892013](https://doi.org/10.3389/fchem.2022.892013)

<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fchem.2022.892013>

Scopus<sup>®</sup>

**Charged Lithium adsorption on pristine and defective silicene: A theoretical study (Completo, 2022)**

Julián Juan, FERNÁNDEZ-WERNER, L., Pablo Bechthold, Julián Villarreal, Francisco Gaztañaga, Paula V. Jasen, FACCIIO, R., Estela A. González

Journal of Physics Condensed Matter, v.: 34 24, p.:24500 2022

Palabras clave: silicene defect lithium Charged Li-ion; DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Baterías de ion-litio

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09538984

E-ISSN: 1361648X

DOI: [10.1088/1361-648x/ac630a](https://doi.org/10.1088/1361-648x/ac630a)

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/ac630a>

Scopus<sup>®</sup>

**Editorial: The Physical Chemistry of Organic-Inorganic Interfaces as a Key to Understanding Hybrid Nanomaterials (Completo, 2022)**

FACCIIO, R., MOMBRÚ, A W, Alfredo Juan, André A. Pasa, M. ROMERO

Frontiers in Chemistry, v.: 10 2022

Palabras clave: organic-inorganic interfaces physical chemistry hybrid nanomaterials surfaces applications

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Materiales híbridos

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

E-ISSN: 22962646

DOI: [10.3389/fchem.2022.952268](https://doi.org/10.3389/fchem.2022.952268)

Scopus<sup>®</sup>

**Arsenic adsorption on nanoscale zerovalent iron immobilized on reduced graphene oxide (nZVI/rGO): experimental and theoretical approaches (Completo, 2022)**

Caio Vinicius de Lima , Julian Juan , FACCIO, R. , Estela González , Carolina Pistonesi , Marcelo Pistonesi , Julio Reboucas

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 126 46 , p.:19916 - 19925, 2022

Palabras clave: Arsenic nZVI Reduced graphene oxide.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales: Simulación Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.2c06206](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c06206)

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.2c06206>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> and MoS<sub>2</sub> soft coatings: a comparative study of their frictional behavior under different humidity levels, normal loads, and sliding speeds (Completo, 2021)**

Bruno Pilotti , Germán Prieto , Alfredo Juan , FACCIO, R. , E. Broitman , Mariana Dennehy , Walter R. Tuckart

Tribology Letters, v.: 69 3 , p.:112 - 112, 2021

Palabras clave: Bismuth sulfide Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> solid lubricants soft coatings ab initio calculations DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Tribología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 10238883

E-ISSN: 15732711

DOI: [10.1007/s11249-021-01486-y](https://doi.org/10.1007/s11249-021-01486-y)

<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11249-021-01486-y>

Scopus<sup>®</sup>

**Thermodynamic functions and vibrational properties of Li intercalation in TiO<sub>2</sub>(B) (Completo, 2021)**

Julian Juan , FERNÁNDEZ-WERNER, L. , P. Bechthold , M. J. Jiménez , P.V. Jasen , FACCIO, R. , Estela González

Applied Surface Science, v.: 566 p.:15067 - 15067, 2021

Palabras clave: TiO<sub>2</sub>(B) DFT Raman Thermodynamics Lithium

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Estructura Electrónica: Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2021.150679](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.150679)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433221017451>

Scopus<sup>®</sup>

**Synthesis and characterization of a bovine collagen: GAG scaffold with Uruguayan raw material for tissue engineering (Completo, 2021)**

PEREIRA L. , L. Echarte , M. ROMERO , Guillermo Grazioli , Héctor Pérez-Campos , A. Francia , W. Vicentino , MOMBRÚ, A W , FACCIO, R. , Inés Alvarez , TOURINO C , PARDO, H.

Cell and Tissue Banking, 2021

Palabras clave: colágeno piel artificial tissue engineering

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / biomateriales

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 13899333

E-ISSN: 15736814

DOI: [10.1007/s10561-021-09960-6](https://doi.org/10.1007/s10561-021-09960-6)

<https://link.springer.com/article/10.1007/s10561-021-09960-6>

Scopus<sup>®</sup>

**Insights on the structural and electrical transport of sodium titanate nanotubes decorated with CuInS<sub>2</sub>**

**quantum dots heterostructures (Completo, 2021)**

Martin Esteves, MOMBRÚ, D, M. ROMERO, FERNÁNDEZ-WERNER, L., FACCIIO, R., MOMBRÚ, A W

Applied Surface Science, v.: 535 p.:14773 2021

Palabras clave: CIGS nanotubes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01694332

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147733>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433220324909>

Scopus'

**The effect of morphology on the optical and electrical properties of sodium titanate nanostructures (Completo, 2021)**

Lucía Amy, S FAVRE, GAU D.L, FACCIIO, R.

Applied Surface Science, v.: 555 p.:14961 2021

Palabras clave: Sodium titanate nanotubes Confocal Raman spectroscopy EXAFS HRTEM optical characterization electrical characterization.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Materials Science and Nanotechnology: Energy

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2021.149610](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149610)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433221006863#>

Scopus'

**From chain- to graphene-like hydroxyl-terminated (ZnO)<sub>n</sub> clusters with n < 6 obtained via zinc methoxide hydrolysis and condensation: Ab initio structural, electronic, vibrational and optical properties calculations (Completo, 2021)**

M. ROMERO, MOMBRÚ, D, F. Pignanelli, FACCIIO, R., MOMBRÚ, A W

ChemPhysChem, v.: 22 p.:849 - 863, 2021

Palabras clave: zinc oxide cluster chain-like graphene-like hydrolysis zinc methoxide

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencias de materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 14397641

DOI: [10.1002/cphc.202100054](https://doi.org/10.1002/cphc.202100054)

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.202100054>

Scopus'

**Elastic stress induced metastable local ordering in Cu-Zr-Al metallic glasses: a numerical simulation study (Completo, 2021)**

F. Pignanelli, FACCIIO, R., Gustavo Sarasúa, A. O. MORENO-GOBBI, Paulo Sergio Silva Jr

Materials Today Communications, v.: 28 2021, p.:10269 - 10269, 2021

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 23524928

DOI: [10.1016/j.mtcomm.2021.102693](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102693)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2352492821006851>

Scopus'

**New Perspective on Thermally Stimulated Luminescence and Crystallization of Barium Borate Oxyfluoride Glasses (Completo, 2021)**

M. RODRIGUEZ, G. AZCUNE, H. BENTOS PEREIRA, FACCIIO, R.

Crystals, v.: 11 7, p.:745 - 745, 2021

Palabras clave: oxyfluoride borates nanocrystals

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Sistemas Vítreos  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 20734352  
DOI: [10.3390/cryst11070745](https://doi.org/10.3390/cryst11070745)  
<https://www.mdpi.com/2073-4352/11/7/745>

Scopus<sup>®</sup>

**Depression of critical temperature due to residual strain induced by PLD deposition on YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-d</sub> thin films (Completo, 2021)**

S FAVRE , D. ARIOSIA , C. Yelpo , Marcos Mazini , FACCIO, R.  
Materials Chemistry and Physics, v.: 266 p.:12450 - 12450, 2021  
Palabras clave: HTSC Thin Films Residual strain PLD deposition Quantum fluctuations  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Superconductividad  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 02540584  
DOI: [10.1016/j.matchemphys.2021.124507](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124507)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S025405842100290X>

Scopus<sup>®</sup>

**Electronic and vibrational properties of the high T<sub>c</sub> superconductor Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub>: an ab-initio study (Completo, 2021)**

C. Yelpo , FACCIO, R. , D. ARIOSIA , S FAVRE  
Journal of Physics Condensed Matter, v.: 33 18 , p.:5705 2021  
Palabras clave: DFT BSCCO vibrational spectra  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09538984  
E-ISSN: 1361648X  
DOI: [10.1088/1361-648X/abed17](https://doi.org/10.1088/1361-648X/abed17)  
<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/abed17>

Scopus<sup>®</sup>

**A simple and economical ultrasound-assisted method for Cd and Pb extraction from fruits and vegetables for food safety assurance (Completo, 2021)**

Mónica Pereira , TISSOT F , FACCIO, R. , IBÁÑEZ, F. , M. PISTÓN  
Results in Chemistry, v.: 3 p.:408 - 418, 2021  
Palabras clave: raman ultra-sound  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Raman  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 22117156  
DOI: [10.1016/j.rechem.2020.100089](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2020.100089)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211715620300679>

Scopus<sup>®</sup>

**Raman spectroscopy signatures for monomeric, dimeric and trimeric zinc dimethoxide with tetrahydrofuran adduct and early hydrolysis-condensation products on Au(111) surface: Theoretical and experimental approach (Completo, 2021)**

M. ROMERO , MOMBRÚ, D. , F. Pignanelli , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W  
Journal of Sol-Gel Science and Technology, v.: 102 p.:160 - 171, 2021  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 15734846  
DOI: <https://doi.org/10.1007/s10971-021-05607-w>  
<https://link.springer.com/article/10.1007/s10971-021-05607-w>  
Raman, SERS, zin dimethoxide

Scopus<sup>®</sup>

**C-doped TiO<sub>2</sub>(B): A Density Functional Theory characterization (Completo, 2021)**

Herman Heffner , FACCIÓ, R. , Ignacio López-Corral  
Applied Surface Science, v.: 551 p.:14947 - 14947, 2021  
Palabras clave: TiO<sub>2</sub>(B) Carbon doping Hubbard parameter Optical properties DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de materiales y nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 01694332  
DOI: [10.1016/j.apsusc.2021.149479](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149479)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433221005559>

Scopus

**Single Molecule Vibrational Spectroscopy: Cobalt-tetraphenylporphyrin deposited on Cu<sub>2</sub>N ultrathin insulating layer (Completo, 2021)**

Bruna Baggio , Weijiong Chen , BENJAMIN MONTENEGRO , Milton Tumelero , FACCIÓ, R. , Vinícius Zoldan , Chun-Lei Gao , Andre Pasa  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 125 18, p.:9695 - 9702, 2021  
Palabras clave: porphyrin CoTPP vibrational spectroscopy DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas / Superficies y Estructura Electrónica Molecular  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 19327447  
E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/acs.jpcc.0c08722](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c08722)  
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.0c08722>

Scopus

**Biogenic silver nanoparticles as a strategy in the fight against multi-resistant Salmonella enterica isolated from dairy calves (Completo, 2021)**

María Belén Estevez , María Laura Casaux , FRAGA M. , FACCIÓ, R. , ALBORÉS, S.  
Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, v.: 9 314, p.:64401 2021  
Palabras clave: biogenic silver nanoparticles biofilm  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 22964185  
DOI: [10.3389/fbioe.2021.644014](https://doi.org/10.3389/fbioe.2021.644014)  
<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fbioe.2021.644014/full>

Scopus

**Short- and long-range structure correlations with ionic transport near the glass transition for lithium-ion polyacrylonitrile-based electrolytes using DMSO plasticizer (Completo, 2021)**

F. Pignanelli , M. ROMERO , FACCIÓ, R. , MOMBRÚ, A W  
Journal of Non-Crystalline Solids, v.: 561 p.:12074 - 12074, 2021  
Palabras clave: lithium-ion polyacrylonitrile-based electrolyte glass transition free volume Arrhenius crossover  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Simulación  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 00223093  
DOI: [10.1016/j.jnoncrysol.2021.120744](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2021.120744)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022309321001034?dgcid=author>

Scopus

**Production of Cadmium Sulfide quantum dots by the lithobiontic Antarctic strain Pedobacter sp. UYP1 and their application as photosensitizer in solar cells (Completo, 2021)**

Carrasco, V. , AMARELLE V. , J.M. Pérez- Donoso , R. Espinoza-González , FABIANO, E. , FACCIÓ, R.  
Microbial Cell Factories, v.: 20 p.:41 2021  
Palabras clave: Antarctica Endoliths Lithobionts Nanoparticle biosynthesis cadmium sulfide 47 nanoparticles QDSSC Pedobacter

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología / biosíntesis

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 14752859

DOI: [10.1186/s12934-021-01531-4](https://doi.org/10.1186/s12934-021-01531-4)

Scopus<sup>®</sup>

**NiLaM (M=Ce and/or Zr) mixed oxide catalysts for synthesis gas production by biogas reforming processes (Completo, 2021)**

VEIGA S. , FACCIO, R. , M. ROMERO , BUSSI, J.

Materials Letters, v.: 293 p.:12972 - 12972, 2021

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Reformado de Gas

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 0167577X

DOI: [10.1016/j.matlet.2021.129724](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129724)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167577X21004201>

Scopus<sup>®</sup>

**Optical, electrical and structural properties of Fe doped sodium titanate nanostructures (Completo, 2021)**

Martin Esteves , FERNÁNDEZ-WERNER, L. , Cristiani Campos Plá Cid , Silvia Pelegrini , André A.

Pasa , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

Applied Surface Science, v.: 552 p.:14953 - 14953, 2021

Palabras clave: Solar Cells DFT Nanotubes iron doped optical properties electric transport

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Celdas Solares

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2021.149534](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149534)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433221006103>

Scopus<sup>®</sup>

**Detection of SOF<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> through nitride aluminium nanosheets: A DFT study (Completo, 2021)**

Alejandro González Fá , FACCIO, R. , Ignacio López-Corral

Applied Surface Science, v.: 538 p.:14789 2021

Palabras clave: DFT AlN Sensor SOF<sub>2</sub> SO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Ciencia de Materiales,

Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2020.147899](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147899)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433220326568>

Scopus<sup>®</sup>

**Biogenic silver nanoparticles: understanding the antimicrobial mechanism using Confocal Raman Microscopy (Completo, 2020)**

Estevez, MB , Scott G. Mitchell , FACCIO, R. , ALBORÉS, S.

Materials Research Express, v.: 6 12 , p.:1250 - 1250, 2020

Palabras clave: Ag nanoparticles biogenic synthesis Raman Microscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología /

Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 20531591

DOI: <https://doi.org/10.1088%2F2053-1591%2Fab6636>

Scopus<sup>®</sup>

**Hydrogen-rich gas production by steam and oxidative steam reforming of crude glycerol over Ni-La-Me**

**mixed oxide catalysts (Me= Ce and/or Zr) (Completo, 2020)**

Santiago Veiga , M. ROMERO , FACCIO, R. , Darío Segobia , Hernán Duarte<sup>3</sup> , Carlos Apesteuguía , BUSSI, J.

Catalysis Today, v.: 344 p.:190 - 198, 2020

Palabras clave: crude glycerol hydrogen nickel catalysts steam reforming

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Catalisis

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09205861

DOI: [10.1016/j.cattod.2019.02.008](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2019.02.008)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586118302414>

Scopus<sup>®</sup>

**Identification of microplastics in wastewater samples by means of polarized light optical microscopy (Completo, 2020)**

I.Sierra , M. RODRIGUEZ , FACCIO, R. , CARRIZO, D , Laura Fornaro , PÉREZ-PARADA A.

Environmental Science and Pollution Research, v.: 27 p.:7409 - 7419, 2020

Palabras clave: Microplastics wastewater water pollution polarized light optical microscopy Raman Microscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Medio Ambiente

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09441344

E-ISSN: 16147499

DOI: <https://doi.org/10.1007/s11356-019-07011-y>

<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11356-019-07011-y>

Scopus<sup>®</sup>

**Mini-Review: Mixed Ionic?Electronic Charge Carrier Localization and Transport in Hybrid Organic? Inorganic Nanomaterials (Completo, 2020)**

M. ROMERO , MOMBRÚ, D , F. Pignanelli , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

Frontiers in Chemistry, v.: 8 p.:537 2020

Palabras clave: mixed ionic transport nano

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

Escrito por invitación

E-ISSN: 22962646

DOI: [10.3389/fchem.2020.00537](https://doi.org/10.3389/fchem.2020.00537)

<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fchem.2020.00537>

Scopus<sup>®</sup>

**Hydrogen storage in AB2 hydride alloys: diffusion processes analysis (Completo, 2020)**

E. TELIZ , M. Abboud , FACCIO, R. , Martin Esteves , ZINOLA, C.F. , V. DÍAZ

Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry, v.: 879 p.:11478 2020

Palabras clave: time diffusion constant GITT hydrogen storage PCT curves metal hydride

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Electroquímica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00220728

DOI: [10.1016/j.jelechem.2020.114781](https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.114781)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1572665720310092>

**Nanocrystals of novel valerolactam-fenbendazole hybrid with improved in vitro dissolution performance (Completo, 2020)**

MELIAN E. , Alejandro Paredes , MUNGUÍA B. , COLOBBIO, M. , RAMOS, J. C. , Teixeira, R. , MANTA, E. , Santiago Palma , FACCIO, R. , DOMÍNGUEZ , L

AAPS PharmSciTech, v.: 21 p.:237 2020

Palabras clave: nanocrystals pharmaceuticals formulation raman XRD

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Tecnología Farmacéutica y Nano

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 15309932

DOI: <https://doi.org/10.1208/s12249-020-01777-y>

<https://link.springer.com/article/10.1208/s12249-020-01777-y>

Scopus'

#### **Theoretical study of Li intercalation in TiO<sub>2</sub>(B) surfaces (Completo, 2020)**

Julián Juan , FERNÁNDEZ-WERNER, L. , Paula V. Jasen , Pablo Bechthold , FACCIO, R. , Estela A. González

Applied Surface Science, v.: 526 p.:14646 2020

Palabras clave: TiO<sub>2</sub>(B) Surfaces DFT NEB Lithium

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Simulación Computacional

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2020.146460](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.146460)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433220312174>

Scopus'

#### **Electrochemical response of carbon doped LiFePO<sub>4</sub> olivine nanoparticles: cobalt doping and temperature calcination effects (Completo, 2020)**

E. TELIZ , M. Martínez , FACCIO, R. , F. Pignanelli , ZINOLA, C.F. , V. DÍAZ

Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry, v.: 878 p.:11458 2020

Palabras clave: olivine nanoparticles cobalt doping li-ion batteries

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: baterías de ion-litio.

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00220728

DOI: [10.1016/j.jelechem.2020.114581](https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.114581)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1572665720308092>

#### **Experimental and theoretical Raman study on the HTSC Pr<sub>x</sub>Y<sub>1-x</sub>Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> family for different Pr concentrations and synthesis methods (Completo, 2020)**

S FAVRE , Marcos Mazini , C. Yelpo , D. ARIOSIA , FACCIO, R.

Materials Chemistry and Physics, v.: 256 p.:12373 2020

Palabras clave: confocal Raman ab-initio calculations HTSC

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Superconductividad

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 02540584

DOI: [10.1016/j.matchemphys.2020.123737](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2020.123737)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0254058420310968>

Scopus'

#### **Prospective application of phthalocyanines in the photodynamic therapy against microorganisms and tumor cells: a mini-review ? (Completo, 2020)**

Karen Loraine Macena Santos , Rafaela Moreno Barros , Diego Paulo da Silva Lima , Adenia Mirela Alves Nunes , Mariana Rillo Sato , FACCIO, R. , Bolívar Ponciano Goulart de Lima Damasceno , João Augusto Oshiro-Junior

Photodiagnosis and Photodynamic Therapy, v.: 32 p.:10223 2020

Palabras clave: drug delivery nanocarriers therapeutic modalities photosensitizer nanocarriers new therapy

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / photodynamic therapy

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 15721000

DOI: [10.1016/j.pdpdt.2020.102032](https://doi.org/10.1016/j.pdpdt.2020.102032)

Scopus<sup>®</sup>

**Ab-initio approach to the stability and the structural, electronic and magnetic properties of the (001) ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> surface terminations (Completo, 2020)**

K. L. Salcedo Rodríguez , J. J. Melo Quintero , H. H. Medina , A. V. Gil Rebaza , FACCIO, R. , W. A. Adeagbo , W. Hergert , C. E. Rodríguez Torres , L. A. Errico  
Applied Surface Science, v.: 499 p.:14385 - 14385, 2020

Palabras clave: Zn-ferrite Surface termination Electronic structure Magnetic response Ab initio  
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2019.143859](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.143859)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433219326753>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Catalytic assessment of a Ni-La-Sn ternary metallic system in ethanol steam reforming and the influence of the Sn/La atomic ratio in the catalytic performance (Completo, 2020)**

MUSSO M. , M. ROMERO , FACCIO, R. , BUSSI, J.

Catalysis Today, v.: 356 p.:408 - 418, 2020

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Catálisis y Ciencia de Materiales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09205861

DOI: [10.1016/j.cattod.2019.05.043](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2019.05.043)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586119302500>

Scopus<sup>®</sup>

**Unraveling lithium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (LiTFSI) doping mechanism of regioregular poly(alkyl thiophene): Experimental and theoretical study (Completo, 2020)**

MOMBRÚ, D , M. ROMERO , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 124 13, p.:7061 - 7070, 2020

Palabras clave: P3HT DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.0c00407](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c00407)

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.0c00407>

Scopus<sup>®</sup>

**A step forward towards the structural characterization of Na<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.H<sub>2</sub>O nanotubes and their correlation with optical and electric transport properties (Completo, 2020)**

Martin Esteves , FERNÁNDEZ-WERNER, L. , F. Pignanelli , M. ROMERO , Mauricio Rodriguez , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

Ceramics International, v.: 46 p.:2877 - 2886, 2020

Palabras clave: DFT nanomaterials ion-transport

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización de materiales. Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Energía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 02728842

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.09.281>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884219328172>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Preparation of In-doped Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ceramics through a sol-gel process: Effects on the structural and electronic properties (Completo, 2020)**

Diego Richard , Mario Rentería , Artur W. Carbonari , M. ROMERO , FACCIO , R.  
Ceramics International, v.: 46 10 , p.:16088 - 16095, 2020

Palabras clave: sol gely2o3 dopping

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 02728842

DOI: [10.1016/j.ceramint.2020.03.161](https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.03.161)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884220307823>

Scopus'

**Ln(III)-Ni(II) heteropolynuclear metal organic frameworks of oxydiacetate with promising proton-conductive properties (Completo, 2020)**

IGOA, F. , M. ROMERO , PEINADO, G. , CASTIGLIONI, J. , Javier González-Platas , FACCIO, R. , SUESCUN, L. , KREMER, C. , TORRES, J

CrystEngComm, v.: 22 p.:5638 - 5648, 2020

Palabras clave: MOFs proton conductivity oxydiacetate crystal structure DFT calculations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / MOF

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 14668033

DOI: [10.1039/D0CE00900H](https://doi.org/10.1039/D0CE00900H)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/ce/d0ce00900h>

Scopus'

**Biofilm Eradication Using Biogenic Silver Nanoparticles (Completo, 2020)**

Estevez, MB , Raffaelli S. , Scott G. Mitchell , FACCIO, R. , ALBORÉS, S.

Molecules, v.: 25 9 , p.:2023 - 2023, 2020

Palabras clave: Ag nanoparticles biofilms microorganism

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanociencia y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

Escrito por invitación

E-ISSN: 14203049

DOI: [10.3390/molecules25092023](https://doi.org/10.3390/molecules25092023)

<https://www.mdpi.com/1420-3049/25/9/2023>

Scopus'

**Utilization of waste crude glycerol for hydrogen production via steam reforming over Ni-La-Zr catalysts (Completo, 2020)**

Santiago Veiga , FACCIO, R. , M. ROMERO , BUSSI, J.

Biomass and Bioenergy, v.: 135 p.:10550 2020

Palabras clave: Crude glycerol Hydrogen Ni?La?Zr mixed oxides Steam reforming

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09619534

DOI: [10.1016/j.biombioe.2020.105508](https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2020.105508)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0961953420300428>

Scopus'

**Structural analysis of oxyfluoride borate glasses and BaF2 crystallization from phase separation (Completo, 2020)**

M. RODRIGUEZ , José Fabian Schneider , R. Keuchkerian , M. ROMERO , FACCIO, R. , ALVARO OLIVERA , H. BENTOS PEREIRA

Journal of the American Ceramic Society, v.: 103 5 , p.:3126 - 3137, 2020

Palabras clave: Oxyfluoride Borate NMR FTIR Raman DSC Crystallization Phase separation

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00027820  
E-ISSN: 15512916  
DOI: [10.1111/jace.17022](https://doi.org/10.1111/jace.17022)  
<https://ceramics.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/jace.17022>

Scopus<sup>®</sup>

**Local structure and magnetic properties of Mn<sup>3+</sup>-O-Fe<sup>3+</sup> superexchange interaction in an oxygen-vacant perovskite: Experimental and theoretical study (Completo, 2019)**

Mariano Romero , FACCIO, R. , Helena Pardo , Benjamín Montenegro , Diego Richard , Javier Martínez , Azucena Marisol Mudarra Navarrob?, Álvaro W. Mombrú  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v.: 469 p.:224 - 230, 2019  
Palabras clave: Perovskite Oxygen vacancies X-ray anomalous diffraction Mössbauer DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 03048853  
DOI: [10.1016/j.jmmm.2018.08.070](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.070)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0304885318311545>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Insights of cobalt doping on carbon-coated LiFePO<sub>4</sub> olivine nanoparticles prepared by citric acid combustion route as cathodes for lithium batteries (Completo, 2019)**

PIGNANELLI, F. , M. ROMERO , MOMBRÚ, D. , E. TELIZ, V. DÍAZ , Jorge Castiglioni , Fernando Zinola , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W  
Ionics, v.: 25 p.:3593 - 3601, 2019  
Palabras clave: Lithium batteries LiFePO<sub>4</sub> nanomaterials  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09477047  
E-ISSN: 18620760  
DOI: [10.1007/s11581-019-02908-7](https://doi.org/10.1007/s11581-019-02908-7)  
<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11581-019-02908-7>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Transition from positive to negative electrical resistance response under humidity conditions for PEDOT:PSS-MoS<sub>2</sub> nanocomposite thin films (Completo, 2019)**

MOMBRÚ, D. , M. ROMERO , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W  
Journal of Materials Science Materials in Electronics, v.: 30 6 , p.:5959 - 5964, 2019  
Palabras clave: MoS<sub>2</sub>PEDOT:PSS composite impedance humidity  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09574522  
E-ISSN: 1573482X  
DOI: [10.1007/s10854-019-00895-z](https://doi.org/10.1007/s10854-019-00895-z)  
<https://link.springer.com/article/10.1007/s10854-019-00895-z>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Nanopartículas de plata biogénicas a partir del hongo *Punctularia atropurpurascens* para el control de microorganismos (Completo, 2019)**

Sanguiniedo, P , Estevez, MB , FACCIO, R. , ALBORÉS, S.  
Mundo Nano Revista Interdisciplinaria en Nanociencia y Nanotecnología, v.: 12 22 , p.:101 - 110, 2019  
Palabras clave: nanoparticles fungi antimicrobials.  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
Lugar de publicación: Mexico  
Escrito por invitación

ISSN: 20075979  
E-ISSN: 24485691  
DOI: <https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2019.22>  
<http://www.mundonano.unam.mx/ojs/index.php/nano/article/view/67627>

**Characterization of the effects involved in ultrasound-assisted extraction of trace elements from artichoke leaves and soybean seeds (Completo, 2019)**

I. MACHADO , FACCIO, R. , M. PISTÓN  
Ultrasonics Sonochemistry, v.: 59 p.:10475 - 10475, 2019  
Palabras clave: ultrasound-assisted extraction trace elements probe bath food  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Sonoquímica y Raman  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 13504177  
DOI: [10.1016/j.ultsonch.2019.104752](https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2019.104752)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1350417719309046>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Electronic and optical properties of sulfur and nitrogen doped graphene quantum dots: A theoretical study (Completo, 2019)**

MOMBRÚ, D , M. ROMERO , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W  
Physica E Low-dimensional Systems and Nanostructures, v.: 113 p.:130 - 136, 2019  
Palabras clave: DFT quantum dots nitrogen doped sulfur doped optical properties  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 13869477  
DOI: [10.1016/j.physe.2019.05.004](https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.05.004)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947719304199>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Detection of Oxytetracycline in honey using SERS on silver nanoparticles (Completo, 2019)**

Alejandro González Fá , F. Pignanelli , Ignacio López-Corral , FACCIO, R. , Alfredo Juan , Maria Susana Di Nezio  
TrAC Trends in Analytical Chemistry, v.: 121 p.:11567 - 11567, 2019  
Palabras clave: Oxytetracycline Honey Silver Nanoparticles SERS DFT  
Areas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Nanotecnología / Nano-materiales / Química Analítica y Simulación Computacional  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 01659936  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.115673>  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0165993619304546>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Lanthanide coordination polymers based on flexible ligands derived from iminodiacetic acid (Completo, 2019)**

R. PUENTES , TORRES, J , FACCIO, R. , Alessia Bacchi , KREMER, C  
Polyhedron, v.: 170 p.:683 - 689, 2019  
Palabras clave: Lanthanide; Coordination polymers; Crystal structure; Potentiometric titrations; Iminodiacetic acid derivatives  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Compuestos de Coordinación  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 02775387  
DOI: [10.1016/j.poly.2019.06.040](https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.06.040)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0277538719304516>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Novel synergistic in situ synthesis of lithium-ion poly(ethylene citrate)-TiO<sub>2</sub> nanocomposites as**

**promising fluorine-free solid polymer electrolytes for lithium batteries (Completo, 2019)**

F. Pignanelli, M. ROMERO, CASTIGLIONI, J., FACCIO, R., MOMBRÚ, A W

Journal of Physics and Chemistry of Solids, v.: 135 p.:10908 - 10908, 2019

Palabras clave: Li-ion Battery Polymer nanofiller

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Caracterización de materiales ciencia de Materiales y Nanotecnología: Energía

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00223697

DOI: [10.1016/j.jpccs.2019.109082](https://doi.org/10.1016/j.jpccs.2019.109082)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022369719309795>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Effect of power ultrasound on quality of fresh-cut lettuce (cv. Vera) packaged in passive modified atmosphere (Completo, 2019)**

M. IRAZOQUI, M. ROMERO, PAULSEN E., BARRIOS S., Nicolás Pérez, FACCIO, R., LEMA, P.

Food and Bioproducts Processing, v.: 117 p.:138 - 148, 2019

Palabras clave: minimally processed fresh-cut shelf-life Confocal Raman Imaging Raman spectroscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Agrícolas / Agricultura, Silvicultura y Pesca / Agronomía, reproducción y protección de plantas / Procesamiento

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 09603085

DOI: [10.1016/j.fbp.2019.07.004](https://doi.org/10.1016/j.fbp.2019.07.004)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960308519301129>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Synthesis, Characterization and Simulation of Lithium Titanate Nanotubes for Dye Sensitized Solar Cells (Completo, 2019)**

Martín Esteves, Luciana Fernández-Werner, Fernando Pignanelli, Benjamín Montenegro, Marcelo

Belluzzi, Mariela Pistón, Mauricio Rodríguez Chialanza, FACCIO, R., Álvaro W. Mombrú

Ceramics International, v.: 45 p.:708 - 717, 2019

Palabras clave: lithium titanate nanotubes solar cells DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 02728842

DOI: [10.1016/j.ceramint.2018.09.233](https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.09.233)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884218326981>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Electric field gradient study on pure and Cd-doped In(111) surfaces: Correlation between experiments at the atomic scale and first-principles calculations (Completo, 2019)**

Germán N. Darriba, FACCIO, R., Mario Rentería

Physical review, v.: 99 19, p.:5435 - 5435, 2019

Palabras clave: PAC DFT Cd In(111)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 24699950

E-ISSN: 2469-9950

DOI: [10.1103/PhysRevB.99.195435](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.195435)

<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.99.195435>

**Role of surface defects on the adsorption of poly(9-vinylcarbazole) on TiO<sub>2</sub> using the monomer as a donor:acceptor model (Completo, 2019)**

MOMBRÚ, D, M. ROMERO, FACCIO, R., MOMBRÚ, A W, Sandoval

Applied Surface Science, v.: 487 p.:1104 - 1110, 2019

Palabras clave: DFT solar cell pvk TiO<sub>2</sub> donor:acceptor

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2019.05.213](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.05.213)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433219315211>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Effectiveness of Micronizing Zinc Borate to Improve Its Fungicidal Properties (Completo, 2019)**

IBÁÑEZ C.M., A.CAMARGO, C. MANTERO, FACCIÓ, R., MALANGA, A., Mario Rabinovich  
BioResources, v.: 14 3, p.:6231 - 6246, 2019

Palabras clave: ZINC BORATE WHITE-ROT PRESERVATIVE FUNGICIDE LEACHING SEM

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Caracterización de materiales

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 19302126

DOI: [10.15376/biores.14.3.6231-6246](https://doi.org/10.15376/biores.14.3.6231-6246)

<https://bioresources.cnr.ncsu.edu/resources/effectiveness-of-micronizing-zinc-borate-to-improve-its->

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Extremely Large Magnetic-Field-Effects on the Impedance Response of TiO<sub>2</sub> Quantum Dots (Completo, 2019)**

Trabajo relevante

MOMBRÚ, D., M. ROMERO, FACCIÓ, R., Milton A. Tumelero, MOMBRÚ, A W  
Scientific Reports, v.: 9 1, p.:5322 2019

Palabras clave: magnetoresistance DFT Quantum Dots TiO<sub>2</sub>

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

E-ISSN: 20452322

DOI: [10.1038/s41598-019-41792-z](https://doi.org/10.1038/s41598-019-41792-z)

<https://www.nature.com/articles/s41598-019-41792-z>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Structural Characterization and Electrochemical Performance of Zr<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>Cr<sub>0.7</sub>Mo<sub>0.3</sub>Ni Alloys (Completo, 2019)**

E. TELIZ, J DIEZ, M. Martínez, Pablo Díaz, Fernando Pignanelli, FACCIÓ, R., Fernando Zinola, V. DÍAZ

JOM, v.: 71 6, p.:1952 - 1961, 2019

Palabras clave: AB<sub>2</sub> alloys hydrogen XRD

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Electroquímica

Medio de divulgación: Otros

E-ISSN: 15431851

DOI: [10.1007/s11837-019-03433-8](https://doi.org/10.1007/s11837-019-03433-8)

<https://link.springer.com/article/10.1007/s11837-019-03433-8>

#### **Experimental and theoretical study on the structural, electrical and optical properties of tantalum-doped ZnO nanoparticles prepared via sol-gel acetate route (Completo, 2018)**

DIEGO RICHARD, MARIANO ROMERO, FACCIÓ, R.

Ceramics International, v.: 44 p.:703 - 711, 2018

Palabras clave: sol-gel ZnO

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 02728842

DOI: [10.1016/j.ceramint.2017.09.232](https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.09.232)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884217321788>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**First row transition metal atoms embedded in multivacancies in a rippled graphene system (Completo, 2018)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Applied Surface Science, v.: 435 p.:102 - 107, 2018

Palabras clave: DFT graphene rippling metal doping

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2017.11.035](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.11.035)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433217332725>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Toward Catalytic Detoxification of Phosphotriesters: Insights from Kinetics and Docking on Solid Surfaces (Completo, 2018)**

Lizandra Zimmermann , Gizelle Almerindo , Michelle Medeiros , Ricardo Affeldt , Eduardo Wanderlind , Adriana Gerola , René Nome , Milton Tumelero , FACCIO, R. , André Pasa , Haidi Fiedler , Faruk Nome

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 122 44 , p.:25530 - 25538, 2018

Palabras clave: catalytic DFT Spinel

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Catálisis y Ciencia de Materiales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b09148](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09148)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.8b09148>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Raman Microscopy Insights on the Out-of-Plane Electrical Transport of Carbon Nanotubes-Doped PEDOT:PSS Electrodes for Solar Cell Applications (Completo, 2018)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

The Journal of Physical Chemistry B, v.: 122 9 , p.:2694 - 2701, 2018

Palabras clave: Raman polymer composite

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15206106

E-ISSN: 15205207

DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b00317](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b00317)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.8b00317>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**SERS and DFT study of silver nanoparticles synthesized with D-glucose. (Completo, 2018)**

Alejandro González Fá , Ignacio López-Corral , FACCIO, R. , Alfredo Juan , María Susana Di Nezio

Journal of Raman Spectroscopy, v.: 49 p.:1756 - 1764, 2018

Palabras clave: SERS Raman Glucose DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de

Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 03770486

E-ISSN: 10974555

DOI: [10.1002/jrs.5466](https://doi.org/10.1002/jrs.5466)

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jrs.5466>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Optimization and characterization of nisin-loaded alginate-chitosan nanoparticles with antimicrobial activity in lean beef (Completo, 2018)**

PATRICIA ZIMET , ÁLVARO W. MOMBRÚ , FACCIO, R. , GIANNINA BRUGNINI , IRIS

MIRABALLES, CATERINA RUFO , HELENA PARDO  
LWT, v.: 91 p.:107 - 116, 2018  
Palabras clave: Raman nisin chi tosan  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 00236438  
DOI: [10.1016/j.lwt.2018.01.015](https://doi.org/10.1016/j.lwt.2018.01.015)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002364381830015X>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molybdenum incorporation on AB2 alloys-Part II. On the synergetic effects of Laves and non-Laves phases (Completo, 2018)**

ERIKA TELIZ , JOAQUÍN DIEZ , FACCIO, R. , ESTEFANÍA GERMÁN , FERNANDO ZINOLA ,  
VERÓNICA DÍAZ  
Journal of Alloys and Compounds, v.: 737 p.:530 - 535, 2018  
Palabras clave: Hydrogen AB2 Lave  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09258388  
DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.12.103](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.12.103)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092583881734286X>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Lithium titanate nanotubes as active fillers for lithium-ion polyacrylonitrile solid polymer electrolytes (Completo, 2018)**

Fernando Pignanelli , Mariano Romero , Martín Esteves , Luciana Fernández-Werner , FACCIO, R. ,  
Álvaro W. Mombrú  
Ionics, v.: 25 6 , p.:2607 - 2614, 2018  
Palabras clave: lithium titanate nanotubes; active filler; lithium-ion; polymer electrolyte  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de  
Materiales y Nanotecnología  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 09477047  
E-ISSN: 18620760  
DOI: [10.1007/s11581-018-2768-z](https://doi.org/10.1007/s11581-018-2768-z)  
<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11581-018-2768-z>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Thermodynamic Analysis of AB2 Hydrides: ZrCr1-xTixNiMo0.3 alloys (Completo, 2018)**

E. TELIZ, V. DÍAZ , Fernando Pignanelli , FACCIO, R. , Fernando Zinola  
Journal of The Electrochemical Society, 2018  
Palabras clave: AB2 Lave alloy  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Ciencia de Materiales  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 00134651  
E-ISSN: 19457111  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Enhancement of Lithium-Ion Transport in Poly(acrylonitrile) With Hydrogen Titanate Nanotube Fillers as Solid Polymer Electrolytes for Lithium-Ion Battery Applications (Completo, 2018)**

FERNANDO PIGNANELLI , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , LUCIANA FERNÁNDEZ-  
WERNER , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 122 3 , p.:1492 - 1499, 2018  
Palabras clave: Li-ion batteries solid electrolyte  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 19327447  
E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b10725](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10725)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.7b10725>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Effects of Native Vacancies in Nb doped MgH<sub>2</sub> Using DFT Calculations (Completo, 2018)**

Francisco Gaztañaga, C. Romina Luna, Valeria Orazi, Estela González, FACCIO, R., Paula Jasen  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 122 49, p.:27955 - 27962, 2018

Palabras clave: NbH DFT Magnetism

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b09857](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09857)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.8b09857>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Curvature and Vacancies in Graphene Quantum Dots (Completo, 2018)**

Dominique Mombrú, Mariano Romero, FACCIO, R., Álvaro W. Mombrú

Applied Surface Science, v.: 462 p.:540 - 548, 2018

Palabras clave: graphene quantum dot curvature effect DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2018.08.141](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.08.141)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433218322785>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Possible doping of single-layer MoS<sub>2</sub> with Pt: A DFT study (Completo, 2018)**

Dominique Mombrú, FACCIO, R., Álvaro W. Mombrú

Applied Surface Science, v.: 462 p.:409 - 416, 2018

Palabras clave: MoS<sub>2</sub> Pt doping electronic structure DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2018.08.143](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.08.143)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433218322803?via%3Dihub>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Possible causes for rippling in a multivacancy graphene system (Completo, 2018)**

DOMINIQUE MOMBRÚ, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 118 7, p.:25529 - 25529, 2018

Palabras clave: graphene DFT rippling

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00207608

E-ISSN: 1097461X

DOI: [10.1002/qua.25529](https://doi.org/10.1002/qua.25529)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.25529/pdf>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Sulfur doping in multivacancy graphene systems (Completo, 2018)**

Dominique Mombrú , FACCIO, R. , Álvaro W. Mombrú  
Applied Surface Science, v.: 459 p.:336 - 344, 2018  
Palabras clave: graphene Sulfur DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 01694332  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.07.218>  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433218321160?via%3Dihub>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Polyaniline intercalated with MoS<sub>2</sub> nanosheets: structural, electric and thermoelectric properties (Completo, 2018)**

Dominique Mombrú , Mariano Romero , FACCIO, R. , Álvaro W. Mombrú  
Journal of Materials Science Materials in Electronics, v.: 29 20 , p.:17445 - 17453, 2018  
Palabras clave: MoS<sub>2</sub> conductive polymer polyaniline thermoelectric  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Otros  
E-ISSN: 1573482X  
DOI: [10.1007/s10854-018-9844-z](https://doi.org/10.1007/s10854-018-9844-z)  
<https://link.springer.com/article/10.1007/s10854-018-9844-z>  
Scopus®

**Emulating porphyrins with a rippled multivacancy graphene system (Completo, 2018)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Applied Surface Science, v.: 436 p.:1173 - 1180, 2018  
Palabras clave: graphene DFT porphyrin  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 01694332  
DOI: [10.1016/j.apsusc.2017.12.162](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.12.162)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433217337509>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molybdenum incorporation on AB<sub>2</sub> alloys-Part I Metallurgical and electrochemical characterization: particle size effect (Completo, 2018)**

ERIKA TELIZ , JOAQUÍN DIEZ , FACCIO, R. , FABRICIO RUIZ , FERNANDO ZINOLA , VERÓNICA DÍAZ  
Journal of Alloys and Compounds, v.: 744 p.:583 - 590, 2018  
Palabras clave: AB<sub>2</sub>  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 09258388  
DOI: [10.1016/j.jallcom.2018](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838818305991>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Comparison of standard DFT and Hubbard-DFT methods in structural and electronic properties of TiO<sub>2</sub> polymorphs and H-titanate ultrathin sheets for DSSC application (Completo, 2018)**

ESTEFANÍA GERMÁN , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Applied Surface Science, v.: 428 p.:118 - 123, 2018  
Palabras clave: DSSC SOLAR CELL DFT+U  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2017.09.141](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.09.141)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433217327897>

Paper a salir en 2018

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**p- and n-type doping with strontium and cerium in the biphasic La<sub>1.55</sub>Nd<sub>0.45</sub>CuO<sub>4</sub> system (Completo, 2018)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , HELENA PARDO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Materials Research Bulletin, v.: 97 p.:136 - 141, 2018

Palabras clave: Superconductivity

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00255408

DOI: [10.1016/j.materresbull.2017.08.061](https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2017.08.061)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0025540817324807>

Paper a salir en 2018

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Hydrogen Titanate Nanotubes for Dye Sensitized Solar Cells Applications: Experimental and Theoretical Study (Completo, 2018)** Trabajo relevante

Fernando Pignanelli , Luciana Fernández-Werner , Mariano Romero , Dominique Mombrú , Milton A.

Tumelero , André A. Pasa , Estefanía Germán , FACCIO, R. , Álvaro W. Mombrú

Materials Research Bulletin, v.: 106 p.:40 - 48, 2018

Palabras clave: Solar Cells DSSC nanotubes hydrogen titanate DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de

Materiales y Nanotecnología

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00255408

DOI: [10.1016/j.materresbull.2018.05.029](https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2018.05.029)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0025540818307360>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Electrodeposited Cu<sub>2</sub>O doped with Cl: electrical and optical properties (Completo, 2018)**

SILVIA PELEGRINI , MILTON A. TUMELERO , IURI S. BRANDT , R. D. DELLA PACE , FACCIO, R. , ANDRÉ A. PASA

Journal of Applied Physics, v.: 123 p.:161567 - 161567, 2018

Palabras clave: DFT Cu<sub>2</sub>O electrical

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00218979

E-ISSN: 10897550

DOI: [10.1063/1.5004782](https://doi.org/10.1063/1.5004782)

<http://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.5004782>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Role of conducting polyaniline interphase on the low field magnetoresistance for LSMO-PANI nanocomposites (Completo, 2018)**

Mariano Romero , FACCIO, R. , Benjamín Montenegro , Milton A. Tumelero , Cristiani Campos Plá Cid , André A. Pasa , Álvaro W. Mombrú

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v.: 466 p.:446 - 451, 2018

Palabras clave: conductive polymer Ismo PANI Magnetotransport

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de

Materiales: magnetotransport

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 03048853

DOI: [10.1016/j.jmmm.2018.07.053](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.07.053)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488531831655X?via%3Dihub>

**Development of oxyfluoroborate glass ceramics doped with Er<sup>3+</sup> and Yb<sup>3+</sup> (Completo, 2018)**

MAURICIO RODRIGUEZ CHIALANZA, ROMINA KEUCHKERIAN, LAURO MAIA, JESIEL CARVALHO, LEOPOLDO SUESCUN, FACCIO, R., LAURA FORNARO

Journal of Materials Science Materials in Electronics, v.: 29 7, p.:5472 - 5479, 2018

Palabras clave: glass ceramic oxyfluoroborate

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 1573482X

DOI: [10.1007/s10854-017-8514-x](https://doi.org/10.1007/s10854-017-8514-x)

<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10854-017-8514-x>

**TiO<sub>2</sub>(B) and Anatase Angstrom-Scale Wires: A Theoretical Study (Completo, 2018)**

LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER, ESTELA ANDREA GONZÁLEZ, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 122 6, p.:3363 - 3370, 2018

Palabras clave: DFT TiO<sub>2</sub> atomic wires

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b10418](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10418)

<http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.7b10418>

**Defects controlling electrical and optical properties of electrodeposited Bi doped Cu<sub>2</sub>O (Completo, 2018)**

Brandt, Tumelero, Martins, Plá Cid, FACCIO, R., Pasa

Journal of Applied Physics, v.: 123 16, p.:1412 - 1412, 2018

Palabras clave: Cu<sub>2</sub>O Bismuth Electrical Properties DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00218979

E-ISSN: 10897550

DOI: [10.1063/1.5007052](https://doi.org/10.1063/1.5007052)

<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.5007052>

**Effect of graphene-oxide on the microstructure and charge carrier transport of polyaniline nanocomposites under low applied electric fields (Completo, 2017)**

DOMINIQUE MOMBRÚ, MARIANO ROMERO, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Applied Physics, v.: 121 p.:45109 - 45109, 2017

Palabras clave: PANI Graphene Oxide

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00218979

E-ISSN: 10897550

DOI: [10.1063/1.4974970](https://doi.org/10.1063/1.4974970)

<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4974970>

**Mechanical properties and electronic structure of edge doped graphene nanoribbons with F, O and Cl atoms (Completo, 2017)**

SEBASTIAN PIRIZ , LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , HELENA PARDO , PAULA JASEN ,  
FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 19 p.:21474 - 21480, 2017

Palabras clave: graphene DFT nanoribbons

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

DOI: [10.1039/C7CP02948A](https://doi.org/10.1039/C7CP02948A)

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/cp/c7cp02948a>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Using density functional theory to increase the accuracy of experimental crystal structures: the case of potassium peroxocarbonate (Completo, 2017)**

FACCIO, R. , PATRICIA SAENZ-MÉNDEZ , MARTINA KIENINGER , OSCAR N. VENTURA

Journal of Molecular Structure, v.: 1146 p.:1 - 4, 2017

Palabras clave: DFT Crystal structure peroxocarbonate

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00222860

DOI: [10.1016/j.molstruc.2017.05.115](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.05.115)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002228601730724X>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Raw montmorillonite modified with iron for photo-Fenton processes: influence of iron content on textural, structural and catalytic properties. (Completo, 2017)**

MARÍA ANDREA DE LEÓN , MAYRA RODRÍGUEZ , SERGIO GUSTAVO MARCHETTI , KARIM SAPAG , FACCIO, R. , MARTA SERGIO , JUAN BUSSI

Journal of Environmental Chemical Engineering, v.: 5 5 , p.:4742 - 4750, 2017

Palabras clave: photo-Fenton montmorillonite

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 22133437

DOI: [10.1016/j.jece.2017.09.014](https://doi.org/10.1016/j.jece.2017.09.014)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2213343717304529>

Scopus®

**Structural and catalytic stability assessment of Ni-La-Sn ternary mixed oxides for hydrogen production by steam reforming of ethanol (Completo, 2017)**

JUAN BUSSI , MAURICIO MUSSO , ANGIE QUEVEDO , FACCIO, R. , MARIANO ROMERO

Catalysis Today, v.: 296 p.:154 - 162, 2017

Palabras clave: ethanol

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09205861

DOI: [10.1016/j.cattod.2017.04.024](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2017.04.024)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586117302535>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Characterization of titanate nanotubes for energy applications (Completo, 2017)**

LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , FERNANDO PIGNANELLI , BENJAMÍN MONTENEGRO ,  
MARIANO ROMERO , HELENA PARDO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Energy Storage, v.: 12 p.:66 - 77, 2017

Palabras clave: DFT Energy Titanatos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 2352152X  
DOI: [10.1016/j.est.2017.04.002](https://doi.org/10.1016/j.est.2017.04.002)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X17300506>

**The impact of solid dispersion on formulation, using Confocal Micro Raman spectroscopy as tool to probe distribution of components (Completo, 2017)**

ELISA MELIÁN , BEATRIZ MUNGUÍA , FACCIO, R. , SANTIAGO PALMA , LAURA DOMÍNGUEZ  
Journal of Pharmaceutical Innovation, v.: 13 p.:58 - 68, 2017  
Palabras clave: Confocal Raman Solid dispersion  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 18725120  
E-ISSN: 19398042  
DOI: [10.1007/s12247-017-9306-9](https://doi.org/10.1007/s12247-017-9306-9)  
<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs12247-017-9306-9>  
Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Theoretical Study of New Potential Semiconductor Surfaces Performance for Dye Sensitized Solar Cell Usage: TiO<sub>2</sub>-B (001), (100) and H<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>7</sub> (100) (Completo, 2017)**

ESTEFANÍA GERMÁN , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Applied Surface Science, v.: 426 p.:1182 - 1189, 2017  
Palabras clave: DFT DSSC SOLAR CELLS  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 01694332  
DOI: [10.1016/j.apsusc.2017.08.012](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.08.012)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433217323358>  
Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Experimental and Theoretical Study of Ionic Pair Dissociation in Lithium-Ion-Linear Polyethyleneimine-Polyacrylonitrile Blend for Solid Polymer Electrolytes (Completo, 2017)**

FERNANDO PIGNANELLI , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
The Journal of Physical Chemistry B, v.: 121 27 , p.:6759 - 6765, 2017  
Palabras clave: DFT Li-ion solid state polymer  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 15206106  
E-ISSN: 15205207  
DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b04634](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b04634)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.7b04634>  
Scopus' WEB OF SCIENCE™

**A DFT+U study on structural, electronic, vibrational and thermodynamic properties of TiO<sub>2</sub> polymorphs and hydrogen titanate: tuning the Hubbard (Completo, 2017)**

ESTEFANÍA GERMÁN , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Journal of Physics Communications, v.: 1 5 , p.:55006 - 55006, 2017  
Palabras clave: TiO<sub>2</sub> DFT+U  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 23996528  
DOI: [10.1088/2399-6528/aa8573](https://doi.org/10.1088/2399-6528/aa8573)  
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2399-6528/aa8573/meta>

**Electronic Structure of Edge Modified Graphene Quantum Dots Interacting with Polyaniline: Vibrational and Optical Properties (Completo, 2017)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 121 30, p.:16576 - 16583, 2017  
Palabras clave: DFT optical properties Graphene Quantum Dots

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b03604](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b03604)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.7b03604>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Lanthanide coordination compounds with N-methyliminodipropionic acid: Synthesis, crystal structure and luminescent properties (Completo, 2017)**

ROBERTO PUENTES , JULIA TORRES , JAVIER GONZÁLEZ-PLATAS , PABLO VITORIA , FACCIO, R. , JOAQUÍN GRASSI , IGNACIO CARRERA , GUSTAVO SEOANE , M. REZA DOUSTI , ANDREA S. S. DE CAMARGO , CARLOS KREMER

Inorganica Chimica Acta, v.: 462 p.:308 - 314, 2017

Palabras clave: Crystal structure Lanthanide Potentiometric titrations Luminescence Iminodipropionic acid

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química de Coordinación

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00201693

DOI: [10.1016/j.ica.2017.03.039](https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.03.039)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020169316310714>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Hydrogen production by crude glycerol steam reforming over NiLaTi mixed oxide catalysts (Completo, 2017)**

SANTIAGO VEIGA , FACCIO, R. , DARIO SEGOBIA , CARLOS APESTEGUÍA , JUAN BUSSI  
International Journal of Hydrogen Energy, v.: 42 52 , p.:30525 - 30534, 2017

Palabras clave: Hydrogen Glycerol

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 03603199

DOI: [10.1016/j.ijhydene.2017.10.118](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.10.118)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319917341599>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Microstructure evolution, thermal stability and fractal behavior of water vapor flow assisted in situ growth poly(vinylcarbazole)-titania quantum dots nanocomposites (Completo, 2017)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Journal of Physics and Chemistry of Solids, v.: 111 p.:199 - 206, 2017

Palabras clave: pvk Quantum dots

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223697

DOI: [10.1016/j.jpccs.2017.07.028](https://doi.org/10.1016/j.jpccs.2017.07.028)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022369717312234>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**In situ Growth of Ceramic Quantum Dots in Polyaniline Host via Water Vapor Flow Diffusion as Potential Electrode Materials for Energy Applications (Completo, 2017)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , JORGE CASTIGLIONI , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Solid State Chemistry, v.: 250 p.:60 - 67, 2017

Palabras clave: TiO<sub>2</sub> in situ

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00224596

E-ISSN: 1095726X

DOI: [10.1016/j.jssc.2017.03.016](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2017.03.016)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022459617300877>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**The structural and organic magnetoresistance response of poly(9-vinyl carbazole) using low applied magnetic fields and magnetic nanoparticles additions (Completo, 2017)**

MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , MILTON A. TUMELERO , ANDRÉ A. PASA , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Materials Chemistry C, v.: 5 p.:3779 - 3787, 2017

Palabras clave: pvk magnetoresistant

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 20507526

E-ISSN: 20507534

DOI: [10.1039/c7tc00058h](https://doi.org/10.1039/c7tc00058h)

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/tc/c7tc00058h#!divAbstract>

WEB OF SCIENCE™

**From positive to negative magnetoresistance behavior at low applied magnetic fields for polyaniline:titania quantum dots nanocomposites (Completo, 2017)**

MARIANO ROMERO , DOMINIQUE MOMBRÚ , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Applied Physics, v.: 121 p.:245106 - 245106, 2017

Palabras clave: magnetoresistant Quantum dots

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00218979

E-ISSN: 10897550

DOI: [10.1063/1.4989831](https://doi.org/10.1063/1.4989831)

<http://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.4989831>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Enhanced defect-mediated ferromagnetism in Cu<sub>2</sub>O by Co doping (Completo, 2017)**

IURI BRANDT , MILTON TUMELERO , ENIO LIMA , DOUGLAS LANGIE DA SILVA , FACCIO, R. , ANDRÉ A. PASA

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v.: 441 p.:374 - 386, 2017

Palabras clave: ferromagnetism Cu<sub>2</sub>O

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03048853

DOI: [10.1016/j.jmmm.2017.05.057](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.05.057)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885316333741>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Raman and Impedance Spectroscopy under Applied DC Bias Insights on the Electrical Transport for Donor:Acceptor Nanocomposites Based on Poly(vinyl carbazole) and TiO<sub>2</sub> Quantum Dots (Completo, 2017)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 121 p.:23383 - 23391, 2017

Palabras clave: Raman TiO<sub>2</sub> Donor-acceptor  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 19327447  
E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b08400](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b08400)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.7b08400>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**DFT Study of Methanol Adsorption on PtCo(111) (Completo, 2017)**

VALERIA ORAZI , PABLO BECHTHOLD , JASEN , FACCIIO, R. , MARIA ESTELA PRONSATO ,  
GONZÁLEZ  
Applied Surface Science, v.: 420 p.:383 - 389, 2017  
Palabras clave: DFT Methanol PtCo  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 01694332  
DOI: [10.1016/j.apsusc.2017.05.159](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.05.159)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433217315143>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Novel fluorine-free 2,2'-bis(4,5-dimethylimidazole) additive for lithium-ion poly(methyl methacrylate) solid polymer electrolytes. (Completo, 2016)**

MARIANO ROMERO , FACCIIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
RSC Advances, v.: 6 p.:67150 - 67156, 2016  
Palabras clave: Raman litio solid polymer electrolyte  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 20462069  
DOI: [10.1039/C6RA11838K](https://doi.org/10.1039/C6RA11838K)  
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/ra/c6ra11838k>  
RF: Corresponding Author  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Enhancement of lithium conductivity and evidence of lithium dissociation for Li<sub>0.3</sub>La<sub>0.57</sub>TiO<sub>3</sub> - poly(methylmethacrylate) nanocomposite electrolyte (Completo, 2016)**

MARIANO ROMERO , FACCIIO, R. , SANTIAGO VÁZQUEZ , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Materials Letters, v.: 172 p.:1 - 5, 2016  
Palabras clave: litio electrolito  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 0167577X  
DOI: [10.1016/j.matlet.2016.02.128](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.02.128)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167577X16302907>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Biogenic approaches using citrus extracts for the synthesis of metal nanoparticles: The role of flavonoids in gold reduction and stabilization (Completo, 2016)**

JELVER ALEXANDER SIERRA , CAIO RAPHAEL VANONI , MILTON ANDRÉ TUMELERO ,  
CRISTIANI CAMPOS PLÁCID , FACCIIO, R. , DANTE FERREIRA FRANCESCHINI , TÂNIA BEATRIZ  
CRECZYNSKI-PASA , ANDRÉ AVELINO PASA  
New Journal of Chemistry, v.: 40 p.:1420 - 1429, 2016  
Palabras clave: nanoparticles flavonoids Biogenic  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 11440546  
E-ISSN: 13699261  
DOI: [10.1039/C5NJ02128F](https://doi.org/10.1039/C5NJ02128F)  
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/nj/c5nj02128f>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A van der Waals DFT study of PtH<sub>2</sub> systems absorbed on pristine and defective graphene (Completo, 2016)**

IGNACIO LÓPEZ-CORRAL , SEBASTIAN PIRIZ , FACCIO, R. , ALFREDO JUAN , MARCELO AVENA  
Applied Surface Science, v.: 382 p.:80 - 87, 2016  
Palabras clave: graphene Hydrogen energy  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 01694332  
DOI: [10.1016/j.apsusc.2016.04.057](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.04.057)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016943321630798X>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Microstructure, interparticle interactions and magnetotransport of manganite-polyaniline nanocomposites (Completo, 2016)**

MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , HELENA PARDO , MILTON A. TUMELERO , CRISTIANI CAMPOS PLÁ CID , ANDRE AVELINO PASA , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Materials Chemistry and Physics, v.: 171 1 , p.:178 - 184, 2016  
Palabras clave: nanoparticles SAXS Composites  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
ISSN: 02540584  
DOI: [10.1016/j.matchemphys.2016.01.003](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.01.003)  
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02540584>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Unraveling the Native Conduction of Trichalcogenides and Its Ideal Band Alignment for New Photovoltaic Interfaces (Completo, 2016)**

MILTON A. TUMELERO , FACCIO, R. , ANDRE AVELINO PASA  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 120 3 , p.:1390 - 1399, 2016  
Palabras clave: Nanotechnology SOLAR CELLS Trichalcogenides Native Defects Band alignment  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 19327447  
E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/acs.jpcc.5b10233](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b10233)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.5b10233>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Electrodeposition and Ab initio Studies of Metastable Orthorhombic Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>: a Novel Semiconductor with bandgap for Photovoltaic Applications (Completo, 2016)**

MILTON A. TUMELERO , LUANA BENETTI , EDUARDO ISOPPO , FACCIO, R. , GIOVANNI ZANGARI , ANDRE AVELINO PASA  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 120 22 , p.:11797 - 11806, 2016  
Palabras clave: DFT SOLAR CELLS Bismuth Selenide  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/acs.jpcc.6b02559](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b02559)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.6b02559>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Experimental and theoretical Raman study on the structure and microstructure of Li<sub>0.30</sub>La<sub>0.57</sub>TiO<sub>3</sub> electrolyte prepared by the sol-gel method in acetic medium (Completo, 2016)**

MARIANO ROMERO, FACCIO, R., SANTIAGO VÁZQUEZ, SEBASTIÁN DAVYT, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Ceramics International, v.: 42 14, p.:15414 - 15422, 2016

Palabras clave: Confocal Raman imaging sol-gel lithium electrolyte.lithium battery

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 02728842

DOI: [10.1016/j.ceramint.2016.06.192](https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.06.192)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884216310380>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Tuning Electrical Transport Mechanism of Polyaniline-Graphene Oxide Quantum Dots Nanocomposites for Potential Electronic Device Applications (Completo, 2016)**

DOMINIQUE MOMBRÚ, MARIANO ROMERO, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 120 43, p.:25117 - 25123, 2016

Palabras clave: graphene Electronic Transport

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

E-ISSN: 19327455

DOI: [10.1021/acs.jpcc.6b08954](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b08954)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.6b08954>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Effect of Cu doping on Ba<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Fe<sub>1-x</sub>Cu<sub>x</sub>O<sub>3-δ</sub> perovskites for Solid Oxide Fuel Cells: A first-principles study (Completo, 2016)**

SANTIAGO VÁZQUEZ, LEOPOLDO SUESCUN, FACCIO, R.

Journal of Power Sources, v.: 311 p.:13 - 20, 2016

Palabras clave: DFT Electronic Structure SOFC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 03787753

DOI: [10.1016/j.jpowsour.2016.02.028](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.02.028)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775316301367>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The Role of Interstitial Native Defects in the Topological Insulator Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> (Completo, 2016)**

MILTON A. TUMELERO, FACCIO, R., ANDRÉ A. PASA

Journal of Physics Condensed Matter, v.: 28 p.:425801 - 425801, 2016

Palabras clave: Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09538984

E-ISSN: 1361648X

DOI: [10.1088/0953-8984/28/42/425801](https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/42/425801)

[http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-](http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/28/42/425801/meta;jsessionid=1D3284E7D0EF9B96F52)

[8984/28/42/425801/meta;jsessionid=1D3284E7D0EF9B96F52](http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/28/42/425801/meta;jsessionid=1D3284E7D0EF9B96F52)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Antimicrobial evaluation of new metallic complexes with xylitol active against *P. aeruginosa* and *C. albicans*: MIC determination, post-agent effect and Zn-uptake (Completo, 2016)**

E. SANTI , G. FACCHIN , FACCIO, R. , R. P. BARROSO , A. J. COSTA-FILHO , G. BORTHAGARAY , M. H. TORRE

Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 155 p.:67 - 75, 2016

Palabras clave: xylitol

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Bio Inorgánica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01620134

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2015.11.014](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2015.11.014)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0162013415301203>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Microstructural and magnetotransport studies of novel manganite-sebacic acid nanocomposites prepared at low temperature. (Completo, 2015)**

MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , HELENA PARDO , MILTON A. TUMELERO , ANDRÉ A. PASA , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v.: 377 p.:490 - 495, 2015

Palabras clave: Nanotechnology magnetism MagnetoTransport

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanomateriales

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03048853

DOI: [10.1016/j.jmmm.2014.11.001](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2014.11.001)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885314011044>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Effect of lanthanide on the microstructure and structure of  $\text{LnMn}_0.5\text{Fe}_0.5\text{O}_3$  nanoparticles with Ln=La, Pr, Nd, Sm and Gd prepared by the polymer precursor method (Completo, 2015)**

MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , JAVIER MARTÍNEZ , HELENA PARDO , BENJAMÍN MONTENEGRO , CRISTIANI CAMPOS PLÁ CID , ANDRÉ PASA , A. W. MOMBRÚ

Journal of Solid State Chemistry, v.: 221 p.:325 - 333, 2015

Palabras clave: nanoparticles polymer precursor method

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanomateriales

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00224596

E-ISSN: 1095726X

DOI: [10.1016/j.jssc.2014.10.028](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2014.10.028)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002245961400471X>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Interphase and magnetotransport of LSMO-PMMA nanocomposites obtained by a sonochemical method (Completo, 2015)**

MARIANO ROMERO , HELENA PARDO , FACCIO, R. , MILTON A. TUMELERO , CRISTIANI CAMPOS PLÁ CID , JORGE CASTIGLIONI , ANDRÉ A. PASA , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v.: 382 p.:342 - 348, 2015

Palabras clave: Manganite Nano-composites

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanomateriales

Medio de divulgación: Otros

Lugar de publicación: Amsterdam

ISSN: 03048853

DOI: [10.1016/j.jmmm.2015.02.008](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.02.008)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885315001389>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**New response in electrochemical impedance spectroscopy due to the presence of molybdenum on AB5-type alloys (Completo, 2015)**

VERÓNICA DÍAZ , RITA HUMANA , ERIKA TELIZ , FABRICIO RUIZ , ELIDA CASTRO , FACCIO, R. , FERNANDO ZINOLA

International Journal of Hydrogen Energy, v.: 40 20 , p.:6639 - 6646, 2015

Palabras clave: Hydrogen impedance spectroscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Electroquímica

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 03603199

DOI: [10.1016/j.ijhydene.2015.03.112](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.03.112)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915007569?via%3Dihub>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Correlation between structure, crystallization and thermally stimulated luminescence response of some borate glass and glass-ceramics (Completo, 2015)**

M. RODRIGUEZ CHIALANZA , ROMINA KEUCHKERIAN , ANDRÉS CÁRDENAS , A. OLIVERA , SANTIAGO VÁZQUEZ , FACCIO, R. , JORGE CASTIGLIONI , J.F. SCHNEIDER , LAURA FORNARO

Journal of Non-Crystalline Solids, v.: 427 p.:191 - 198, 2015

Palabras clave: Glass-ceramics thermoluminescence

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Materials Science

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223093

DOI: [10.1016/j.jnoncrysol.2015.07.045](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2015.07.045)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022309315301356>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Electrochemical and metallurgical characterization of ZrCr<sub>1-x</sub>NiMox AB<sub>2</sub> metal hydride alloys (Completo, 2015)**

ERIKA TELIZ , FACCIO, R. , FABRICIO RUIZ , FERNANDO ZINOLA , VERÓNICA DÍAZ

Journal of Alloys and Compounds, v.: 649 p.:267 - 274, 2015

Palabras clave: AB<sub>2</sub>

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Electroquímica

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09258388

DOI: [10.1016/j.jallcom.2015.07.206](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.07.206)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838815306034>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Influence of iron impurities on defected graphene (Completo, 2015)**

FACCIO, R. , HELENA PARDO , FERNANDO M. ARAÚJO MOREIRA , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Chemical Physics, v.: 449 p.:14 - 22, 2015

Palabras clave: Magnetic Carbon Electronic Structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanomateriales

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Holanda

ISSN: 03010104

DOI: [10.1016/j.chemphys.2015.01.008](https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2015.01.008)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010415000191>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**n and p type character of single molecule diodes (Completo, 2015) Trabajo relevante**

V. ZOLDAN , FACCIO, R. , A. A. PASA

, v.: 5 8350 , p.:1 - 8, 2015

Palabras clave: NANOSCIENCE AND TECHNOLOGY Molecular Electronics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanomateriales

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN:

DOI: [10.1038/srep08350](https://doi.org/10.1038/srep08350)

<http://www.nature.com/srep/2015/150210/srep08350/pdf/srep08350.pdf>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Mechanical Properties Calculation of II-VI Semiconductors: Cd<sub>1-y</sub>Zn<sub>y</sub>Te(0 ≤ y ≤ 1) (Completo, 2015)**

ANA MARÍA MARTÍNEZ, R SORIANO, FACCIÓ, R., ALICIA BEATRIZ TRIGUBÓ

Procedia Materials Science, v.: 8 p.:656 - 664, 2015

Palabras clave: DFT CdTe mechanical properties

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 22118128

DOI: [10.1016/j.mspro.2015.04.122](https://doi.org/10.1016/j.mspro.2015.04.122)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211812815001236>

**Synthesis and characterization of La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>Fe<sub>0.8</sub>Cu<sub>0.2</sub>O<sub>3</sub>oxide as cathode for intermediate temperature solid oxide fuel Cells (Completo, 2015)**

SANTIAGO VÁZQUEZ, SEBASTIÁN DAVYT, JUAN F. BASBUS, ANALÍA L. SOLDATI,

ALEJANDRO AMAYA, FACCIÓ, R., LEOPOLDO SUESCUN

Journal of Solid State Chemistry, v.: 228 p.:208 - 213, 2015

Palabras clave: energía SOFC

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00224596

E-ISSN: 1095726X

DOI: [10.1016/j.jssc.2015.04.044](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2015.04.044)

<http://authors.elsevier.com/sd/article/S0022459615001796>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Highly textured Pr<sub>x</sub>Y<sub>1-x</sub>Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-d</sub> polycrystalline ceramics sintered in Ar atmosphere (Completo, 2015)**

SOFIA FAVRE, PAOLA ROMERO, CECILIA STARI, DANIEL ARIOSIA, FACCIÓ, R.

Materials Chemistry and Physics, v.: 155 p.:122 - 128, 2015

Palabras clave: Superconductivity

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Superconductivity

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 02540584

DOI: [10.1016/j.matchemphys.2015.02.008](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2015.02.008)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0254058415001030>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Influence of the structural configuration on the stability and magnetism in multivacancy graphene systems (Completo, 2015)**

FACCIÓ, R., A. W. MOMBRÚ

Computational Materials Science, v.: 97 p.:193 - 200, 2015

Palabras clave: graphene DFT magnetism

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Electronic

Structure

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09270256

DOI: [10.1016/j.commatsci.2014.10.035](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.10.035)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025614007095>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**First-principles study of Cd impurities localized at and near the (001) α-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> surface (Completo,**

2015)

GERMAN DARRIBA, FACCIO, R., MARIO RENTERÍA  
Computational Materials Science, v.: 107 p.:15 - 23, 2015  
Palabras clave: DFT

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09270256

DOI: [10.1016/j.commatsci.2015.04.008](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.04.008)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025615002426?via%3Dihub>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A study on the polymer precursor formation and microstructure evolution of square- shaped  
(La<sub>0.5</sub>Ba<sub>0.5</sub>)(Mn<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.5</sub>)O<sub>3</sub> ceramic nanoparticles (Completo, 2015)**

MARIANO ROMERO, HELENA PARDO, FACCIO, R., LEOPOLDO SUESCUN, SANTIAGO  
VÁZQUEZ, IGNACIO LABORDA, LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER, ÁLVARO ACOSTA, JORGE  
CASTIGLIONI, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of ceramic science and technology, v.: 6 3, p.:221 - 230, 2015

Palabras clave: nanoparticles manganites

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Germany

ISSN: 21909385

E-ISSN: 2190-9385

DOI: [10.4416/JCST2015-00005](https://doi.org/10.4416/JCST2015-00005)

<http://www.ceramic-science.com>

Scopus®

**The effect of manganite nanoparticle addition on the low field magnetoresistance of polyaniline  
(Completo, 2015)**

MARIANO ROMERO, FACCIO, R., HELENA PARDO, MILTON A. TUMELERO, BENJAMÍN  
MONTENEGRO, CRISTIANI CAMPOS PLÁ CID, ANDRÉ A. PASA, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Materials Chemistry C, v.: 3 p.:12040 - 12047, 2015

Palabras clave: Raman nanoparticles manganites magnetoresistance

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Materials Science and Nanotechnology

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 20507526

E-ISSN: 20507534

DOI: [10.1039/c5tc03083h](https://doi.org/10.1039/c5tc03083h)

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/tc/c5tc03083h#!divAbstract>

WEB OF SCIENCE™

**Containers, instruments and pigments: An archaeometric approach to the production and use  
processes of late holocene societies, Santa Lucia (Uruguay) wetlands | [Contenedores, instrumentos y  
pigmentos: Una aproximación arqueométrica a los procesos de producción y uso en las sociedades del  
holoceno tardío en los humedales del Santa Lucía, Uruguay] (Completo, 2015)**

MAIRA MALÁN, LAURA BEOVIDE, ELENA VALLVÉ, FACCIO, R., ALEJANDRO TRUJILLO,  
MIRIAN MEJÍA, HELENA PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ, MARIELA PISTÓN

Chungara, v.: 47 2, p.:219 - 227, 2015

Palabras clave: pigmentos arqueológicos espectroscopia organización tecnológica

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Arqueología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07161182

E-ISSN: 0717-7356

DOI: [10.4067/S0717-73562015005000015](https://doi.org/10.4067/S0717-73562015005000015)

<http://ref.scielo.org/zqdx59>

Scopus®

latindex

**Synthesis, characterization, microbiological evaluation, genotoxicity and synergism tests of new nano silver complexes with sulfamoxole: X-ray diffraction of [Ag<sub>2</sub>(SMX)<sub>2</sub>]-DMSO (Completo, 2014)**

FRANCESCA VELLUTI , ANA ACEVEDO , GRACIELA BORTHAGARAY , JORGE CASTIGLIONI , FACCIO, R. , DAVI FERNANDO BACK , GUILLERMO MOYNA , MARCELA RIZZOTTO , MARÍA H TORRE

Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 141 p.:58 - 69, 2014

Palabras clave: SYNERGISM SULFAMOXOLE

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Bio-Inorgánica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01620134

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2014.08.007](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2014.08.007)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016201341400227X>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Ultrathin (001) and (100) TiO<sub>2</sub>(B) sheets: surface reactivity and structural properties (Completo, 2014)** Trabajo relevante

LUCIANA FERÁNDEZ-WERNER , FACCIO, R. , ALFREDO JUAN , HELENA PARDO , BENJAMÍN MONTENEGRO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Applied Surface Science, v.: 290 p.:180 - 187, 2014

Palabras clave: DFT Nanotechnology SOLAR CELLS Electronic Structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2013.11.029](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.11.029)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433213021065>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of a Novel Tetranuclear Oxo-Bridged Iron(III) Butterfly (Completo, 2014)**

LIVIA ARIZAGA , J.S. GANCHEFF , FACCIO, R. , DIEGO VENEGAS-YAZIGI , ANDREA CANESCHI , R. GONZÁLEZ , CARLOS KREMER , R. CHIOZZONE

Journal of Molecular Structure, v.: 1058 p.:149 - 154, 2014

Palabras clave: DFT magnetic properties polynuclear complexes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / coordinación

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00222860

DOI: [10.1016/j.molstruc.2013.10.070](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2013.10.070)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022286013009290>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Synthesis, crystal structure and magnetic properties of the Re(II) complexes NBu<sub>4</sub>[Re(NO)Br<sub>4</sub>(L)] (L = pyridine and diazine type ligands (Completo, 2013)**

MARIO PACHECO , ALICIA CUEVAS , JAVIER GONZÁLEZ-PLATAS , FACCIO, R. , FRANCESC LLORET , MIGUEL JULVE , CARLOS KREMER

Dalton Transactions, v.: 42 p.:15361 - 15371, 2013

Palabras clave: magnetism x-ray rhenium

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Magnetic properties

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14779226

E-ISSN: 14779234

DOI: [10.1039/C3DT51699G](https://doi.org/10.1039/C3DT51699G)

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/DT/C3DT51699G>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Coupling of Cobalt-Tetraphenylporphyrin Molecules to a Copper Nitride Layer (Completo, 2013)**

VINICIUS ZOLDAN , FACCIO, R. , CHUNLEI GAO , ANDRE AVELINO PASA

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 117 31 , p.:15984 - 15990, 2013

Palabras clave: DFT surface molecular electronic  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / estructura electrónica, nanotecnología  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 19327447  
E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/jp4013625](https://doi.org/10.1021/jp4013625)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp4013625>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Ethanol steam reforming over NiLaZr and NiCuLaZr mixed metal oxide catalysts (Completo, 2013)**

JUAN BUSSI , MAURICIO MUSSO , SANTIAGO VEIGA , NICOLÁS BESPALCO , FACCIO, R. , ANNE-CÉCILE ROGER  
Catalysis Today, v.: 213 p.:42 - 49, 2013  
Palabras clave: catalysis reforming ethanol  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cristalografía  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 09205861  
DOI: [10.1016/j.cattod.2013.04.013](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2013.04.013)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586113001995>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Modelling magnetism of C at O and B monovacancies in graphene (Completo, 2013)**

T. P. KALONI , M. UPADHYAY KAHALY , FACCIO, R. , U. SCHWINGENSCHLÖGL  
Carbon, v.: 64 p.:281 - 287, 2013  
Palabras clave: DFT carbon magnetism nanotechnology  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / estructura electrónica, nanotecnología  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 00086223  
DOI: [10.1016/j.carbon.2013.07.062](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.07.062)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008622313006969>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Hybrid compounds based on fullerene and polycyclic aromatic hydrocarbons with absorption in the near infrared region (Completo, 2013)**

FACCIO, R. , H. PARDO , A. W. MOMBRÚ  
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1018 p.:50 - 58, 2013  
Palabras clave: Nanotechnology Dyes optical properties near infrared  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / estructura electrónica, nanotecnología  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 2210271X  
E-ISSN: 22102728  
DOI: [10.1016/j.comptc.2013.06.012](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2013.06.012)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X13002429>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molybdenum effect on the kinetic behaviour of a metal hydride electrode (Completo, 2013)**

ERIKA TELIZ , FACCIO, R. , FABRICIO RUIZ , FERNANDO ZINOLA , VERÓNICA DÍAZ  
International Journal of Hydrogen Energy, v.: 38 p.:12811 - 12816, 2013  
Palabras clave: XRD Hydrogen energy  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / energía  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 03603199  
DOI: [10.1016/j.ijhydene.2013.07.079](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.07.079)  
<http://www.journals.elsevier.com/international-journal-of-hydrogen-energy/>

**Bisphosphonate metal complexes as selective inhibitors of Trypanosoma cruzi farnesyl diphosphate synthase (Completo, 2012)**

BRUNO DEMORO , FRANCESCO CARUSO , MIRIAM ROSSI , DIEGO BENÍTEZ , MERCEDES GONZÁLEZ , HUGO CERECETTO , MELINA GALIZZI , LEENA MALAYIL , ROBERTO DOCAMPO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ , DINORAH GAMBINO , LUCÍA OTERO

Dalton Transactions, v.: 41 21, p.:6468 - 6476, 2012

Palabras clave: XRD

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14779226

E-ISSN: 14779234

DOI: [10.1039/C2DT12179D](https://doi.org/10.1039/C2DT12179D)

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2012/dt/c2dt12179d#!divAbstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Raman characterization of bulk ferromagnetic nanostructured graphite (Completo, 2012)**

H. PARDO , NGWASHI DIVINE KHANE , FACCIO, R. , F.M. ARAUJO-MOREIRA , LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , TATIANA MAKAROVA , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Physica B Condensed Matter, v.: 407 16, p.:3206 - 3209, 2012

Palabras clave: Nanotechnology magnetic graphite Raman

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 09214526

DOI: [10.1016/j.physb.2011.12.066](https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.12.066)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452611012592>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Electronic Structure of  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slabs: a local environment study (Completo, 2012)**

G. N. DARRIBA , FACCIO, R. , M. RENTERIA

Physica B Condensed Matter, v.: 407 p.:3093 - 3095, 2012

Palabras clave: AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub> surfaces

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología, computational simulation DFT

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 09214526

DOI: [10.1016/j.physb.2011.12.033](https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.12.033)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452611012269>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The conformations of two copper(I) complexes of 1H-benzimidazole-2(3H)-thione and thiosaccharinate (Completo, 2012)**

MARIANA DENNEHY , O. V. QUINZANI , FACCIO, R. , ELEONORA FREIRE , A. W. MOMBRÚ

Acta Crystallographica Section C Crystal Structure Communications, v.: C68 2012

Palabras clave: cristalografía compuestos metalorgánicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía, Compuestos Coordinación

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01082701

E-ISSN: 16005759

DOI: [10.1107/S0108270111052036](https://doi.org/10.1107/S0108270111052036)

<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S0108270111052036>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**7. An approach to molecular characteristic of collagen mesh extracellular matrix in processed tissue banking, by diffractive techniques (Completo, 2012)**

H. PÉREZ CAMPOS , M. SALDIAS , G. SANCHEZ , P. MARTUCCI , MC. ACOSTA , FACCIO, R. , L.

SUESCUN , M. ROMERO , A. W. MOMBRÚ

Cryobiology, v.: 65 3 , p.:340 - 341, 2012

Palabras clave: cryopreservation x-ray diffraction

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / criopreservación

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00112240

E-ISSN: 10902392

DOI: [10.1016/j.cryobiol.2012.07.008](https://doi.org/10.1016/j.cryobiol.2012.07.008)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011224012001320>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**The structure of cubic MOF  $[Ca(H_2O)_6]_2[CaGd(oxydiacetate)_3]_2 \cdot 4H_2O$ . A comparison between structural models obtained from Rietveld refinement of conventional and synchrotron X-ray powder diffraction data and standard refinement of single-crystal X-ray diffraction data (Completo, 2012)**

L. SUESCUN , JUN WANG , FACCIIO, R. , G. PEINADO , J. TORRES , C. KREMER , R. A. BURROW

Powder Diffraction, v.: 27 4 , p.:232 - 242, 2012

Palabras clave: x-ray diffraction MOF

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 08857156

E-ISSN: 19457413

DOI: [10.1017/S0885715612000681](https://doi.org/10.1017/S0885715612000681)

[http://journals.cambridge.org/download.php?](http://journals.cambridge.org/download.php?file=%2FPDJ%2FPDJ27_04%2FS0885715612000681a.pdf&code=bdc4)

[file=%2FPDJ%2FPDJ27\\_04%2FS0885715612000681a.pdf&code=bdc4](http://journals.cambridge.org/download.php?file=%2FPDJ%2FPDJ27_04%2FS0885715612000681a.pdf&code=bdc4)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Magnetism in multivacancies graphene systems (Completo, 2012)**

FACCIIO, R. , A. W. MOMBRÚ

Journal of Physics Condensed Matter, v.: 24 37 , p.:375304 - 375304, 2012

Palabras clave: graphene DFT Nanotechnology magnetism

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología, electronic structure

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09538984

E-ISSN: 1361648X

DOI: [10.1088/0953-8984/24/37/375304](https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/37/375304)

<http://iopscience.iop.org/0953-8984/24/37/375304/>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Physical properties of nanofluid suspension of ferromagnetic graphite with high Zeta potential (Completo, 2012)**

N.S. SOUZA , A.D. RODRIGUES , C.A. CARDOSO , H. PARDO , FACCIIO, R. , A.W. MOMBRÚ , J.C.

GALZERANI , O.F. DE LIMA , S. SERGEENKOV , F.M. ARAUJO-MOREIRA

Physics Letters A, v.: 376 4 , p.:544 - 546, 2012

Palabras clave: graphite, magnetic properties

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03759601

DOI: [10.1016/j.physleta.2011.11.050](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2011.11.050)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2011.11.050>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Stability Issues and Structure-Sensitive Magnetic Properties of Nanofluid Ferromagnetic Graphite (Completo, 2012)**

N. S. SOUZA , S. SERGEENKOV , A. D. RODRIGUES , C. A. CARDOSO , H. PARDO , FACCIIO, R. , A.

W. MOMBRÚ , J. C. GALZERANI , O. F. DE LIMA , F. M. ARAUJO-MOREIRA

Journal of Nanofluids, v.: 1 2 , p.:143 - 147, 2012

Palabras clave: nanofluids Magnetic Carbon

Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 2169432X  
E-ISSN: 21694338  
DOI: [10.1166/jon.2012.1022](https://doi.org/10.1166/jon.2012.1022)  
<http://www.ingentaconnect.com/content/asp/jon/2012/00000001/00000002/art00005>

**How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of defects? (Completo, 2012)**

PABLO A. DENIS, FACCIO, R., FEDERICO IRIBARNE  
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 995 p.:1 - 7, 2012  
Palabras clave: graphene DFT Nanotechnology  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología, electronic structure  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 2210271X  
E-ISSN: 22102728  
DOI: [10.1016/j.comptc.2012.06.014](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2012.06.014)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X12003052>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Comparative study of nanoporous Ln-Cu coordination polymers containing iminodiacetate as bridging ligand (Completo, 2011)**

J. TORRES, P. MORALES, S. DOMÍNGUEZ, J. GONZÁLEZ-PLATAS, FACCIO, R., J. CASTIGLIONI, A. W. MOMBRÚ, C. KREMER  
Journal of Molecular Structure, v.: 1004 p.:215 - 221, 2011  
Palabras clave: Heterometallic coordination polymer lanthanide ions Crystal structure Chemical speciation  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 00222860  
DOI: [10.1016/j.molstruc.2011.08.007](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2011.08.007)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022286011006399>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Modulation of the Physicochemical Properties of Heteropolynuclear Assemblies Containing Lanthanide Ions and 2,20-oxydiacetate (Completo, 2011)**

C. KREMER, J. TORRES, F. PELUFFO, V. PINTOS, L. SUESCUN, FACCIO, R., A. W. MOMBRÚ, S. DOMÍNGUEZ  
Macromolecular Symposia, v.: 304 p.:72 - 79, 2011  
Palabras clave: MOF, DRX  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Metallorganic frameworks, DRX  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 10221360  
E-ISSN: 15213900  
DOI: [10.1002/masy.201150610](https://doi.org/10.1002/masy.201150610)  
<http://www.wiley-vch.de/publish/en/journals/alphabeticIndex/2265/>

Scopus'

**Oxidation of monovacancies in graphene by oxygen molecules (Completo, 2011)**

T. P. KALONI, Y. C. CHENG, FACCIO, R., U. SCHWINGENSCHLÖGL  
Journal of Materials Chemistry, v.: 21 45, p.:18284 - 18288, 2011  
Palabras clave: DFT, graphene, nanotechnology  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / estructura electrónica, nanotecnología  
Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: London, England  
ISSN: 09599428  
E-ISSN: 13645501  
DOI: [10.1039/C1JM12299A](https://doi.org/10.1039/C1JM12299A)  
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/jm/2011/c1jm12299a#!divAbstract>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The Electrochemical Development of Pt(111) Stepped Surfaces and Its Influence on Methanol Electrooxidation (Completo, 2011)**

VERÓNICA DÍAZ, C. F. ZINOLA, ERIKA TELIZ, FACCIIO, R., A. W. MOMBRÚ  
International Journal of Electrochemistry, v.: 2011 289032, p.:1 - 9, 2011  
Palabras clave: Electrochemistry, XRD  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Electroquímica  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 20903537  
DOI: [10.4061/2011/289032](https://doi.org/10.4061/2011/289032)  
<http://www.hindawi.com/journals/ijelc/2011/289032/>

**Synthesis, crystal structures, electrochemical and magnetic properties of polynuclear {Fe<sub>4</sub>} and {Fe<sub>8</sub>Na<sub>4</sub>} carboxylate/picolinate clusters (Completo, 2011)**

LIVIA ARIZAGA, FERNANDA CERDÁ, FACCIIO, R., A. W. MOMBRÚ, M. A. NOVAK, R. GONZÁLEZ, C. KREMER, R. CHIOZZONE  
Inorganica Chimica Acta, v.: 370 p.:427 - 434, 2011  
Palabras clave: Iron(III) carboxylate clusters Magnetic properties.  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / clusters & propiedades magnéticas  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 00201693  
DOI: [10.1016/j.ica.2011.02.021](https://doi.org/10.1016/j.ica.2011.02.021)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020169311001666>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Current trends in materials for dye sensitized solar cells (Completo, 2011)**

FACCIIO, R., L. FERNANDEZ-WERNER, HELENA PARDO, A. W. MOMBRÚ  
Recent Patents on Nanotechnology, v.: 5 1, p.:46 - 61, 2011  
Palabras clave: solar cells DSSC TiO<sub>2</sub>  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas Solares & Nanotecnología  
Medio de divulgación: Papel  
Escrito por invitación  
ISSN: 18722105  
DOI: [10.2174/187221011794474930](https://doi.org/10.2174/187221011794474930)  
<http://www.eurekaselect.com/94296/article>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Electronic and structural distortions in graphene induced by carbon vacancies and boron doping (Completo, 2010)**

FACCIIO, R., L. FERNANDEZ-WERNER, H. PARDO, CECILIA GOYENOLA, O. N. VENTURA, A. W. MOMBRÚ  
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 114 44, p.:18961 - 18971, 2010  
Palabras clave: DFT, graphene  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotechnology  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 19327447  
E-ISSN: 19327455  
DOI: [10.1021/jp106764h](https://doi.org/10.1021/jp106764h)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp106764h>

**Structural and theoretical studies of (E,E)-benzaldehyde azine and its rhenium(IV) complex (Completo, 2010)**

V. PINTOS, ALICIA CUEVAS, SILVIA ONETTO, GUSTAVO SEOANE, P. A. DENIS, J.S. GANCHEFF, FACCIO, R., A. W. MOMBRÚ, C. KREMER

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 963 1, p.:9 - 15, 2010

Palabras clave: X-ray structure DFT calculations Dicatchol Rhenium(IV)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / estructura

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

DOI: [10.1016/j.molstruc.2009.09.028](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2009.09.028)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002228600900605X>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Is It Possible to Dope Single-Walled Carbon Nanotubes and Graphene with Sulfur? (Completo, 2009)** Trabajo relevante

P. A. DENIS, FACCIO, R., A. W. MOMBRÚ

ChemPhysChem, v.: 10 4, p.:715 - 722, 2009

Palabras clave: nanotubes, sulfur, doping

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología / DFT

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: papel

ISSN: 14394235

E-ISSN: 14397641

DOI: [10.1002/cphc.20080059](https://doi.org/10.1002/cphc.20080059)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.200800592/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Hydrogenated double wall carbon nanotubes (Completo, 2009)**

P. A. DENIS, FEDERICO IRIBARNE, FACCIO, R.

The Journal of Chemical Physics, v.: 130 19, p.:194704 - 194704, 2009

Palabras clave: DFT Carbon Nanotubes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulacion, Teoría DFT

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219606

E-ISSN: 10897690

DOI: [10.1063/1.3133947](https://doi.org/10.1063/1.3133947)

<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/130/19/10.1063/1.3133947>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Mechanical properties of Graphene Nanoribbons (Completo, 2009)**

FACCIO, R., PABLO A. DENIS, HELENA PARDO, CECILIA GOYENOLA, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Physics Condensed Matter, v.: 21 28, p.:285304 - 285304, 2009

Palabras clave: nanotechnology, DFT, Mechanical Properties

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Simulaciones por DFT

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09538984

E-ISSN: 1361648X

DOI: [10.1088/0953-8984/21/28/285304](https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/28/285304)

[iopscience.iop.org/0953-8984/21/28/285304](http://iopscience.iop.org/0953-8984/21/28/285304)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Synthesis of 9-Substituted-1,8-Dioxooctahydroxanthenes by an Efficient Iodine-Catalyzed Cyclization (Completo, 2009)**

LILIANA E. LUNA, RAQUEL M. CRAVERO, FACCIO, R., HELENA PARDO, ÁLVARO W.

MOMBRÚ, GUSTAVO SEOANE  
European Journal of Organic Chemistry, v.: 18 p.:3052 - 3057, 2009  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 1434193X  
E-ISSN: 10990690  
DOI: [10.1002/ejoc.200801233](https://doi.org/10.1002/ejoc.200801233)  
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ejoc.200801233/pdf>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Magnetism induced by single carbon vacancies in a three-dimensional graphitic network (Completo, 2008)** Trabajo relevante

FACCIO, R., H. PARDO, P. A. DENIS, R. YOSHIKAWA OEIRAS, F. M. ARAÚJO MOREIRA, M. VERÍSSIMO-ALVES, A. W. MOMBRÚ  
Physical Review B, v.: 77 3, p.:35416 - 35416, 2008  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / síntesis, caracterización Física y simulación  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 10980121  
E-ISSN: 1550235X  
DOI: [10.1103/PhysRevB.77.035416](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.035416)  
<http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.77.035416>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Control of Cryopreservation Procedures on Blood Vessels Using Fiber X-Ray Diffraction (Completo, 2008)**

H. PÉREZ CAMPOS, M.C. SALDÍAS, W. SILVA, D. MACHIN, L. SUESCUN, FACCIO, R., A. W. MOMBRÚ, I. ALVAREZ  
Transplantation Proceedings, v.: 40 3, p.:668 - 674, 2008  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Caracterización de Biomateriales-Cristalografía  
Medio de divulgación: Papel  
E-ISSN: 00411345  
DOI: [10.1016/j.transproceed.2008.02.025](https://doi.org/10.1016/j.transproceed.2008.02.025)  
[http://www.transplantation-proceedings.org/article/S0041-1345\(08\)00134-6/abstract](http://www.transplantation-proceedings.org/article/S0041-1345(08)00134-6/abstract)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The preparation and properties of Ni-La-Zr catalysts for the steam reforming of ethanol (Completo, 2008)**

J. BUSSI, N. BESPALKO, S. VIEGA, A. AMAYA, FACCIO, R., M. CRISTINA ABELLO  
Chemical Communications, v.: 10 1, p.:33 - 38, 2008  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Catalizadores- caracterización  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 13597345  
E-ISSN: 1364548X  
DOI: [10.1016/j.catcom.2008.07.028](https://doi.org/10.1016/j.catcom.2008.07.028)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1566736708003117>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Theoretical characterization of thioepoxidated single wall carbon nanotubes (Completo, 2008)**

P. A. DENIS, FACCIO, R.  
Chemical Physics Letters, v.: 460 4-6 --, p.:486 - 491, 2008  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / síntesis, caracterización Física y simulación  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 00092614  
DOI: [10.1016/j.cplett.2008.06.031](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.06.031)  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261408008452>

**Tetrakis[ $\mu$ -2-(3-phenoxyphenyl)propionato- $\kappa$ 2O]bis-[(dimethylformamide- $\kappa$ O)copper(II)] (Completo, 2008)**

AGOTEGARAY, M. , QUINZANI, O. , FACCIO, R. , GOYENOLA, C. , MOMBRÚ, A. W.

Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online, v.: E64 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear /

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 16005368

DOI: [10.1107/S1600536808038786](https://doi.org/10.1107/S1600536808038786)

<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S1600536808038786>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Synthesis and Spectroscopic Characterization of New Lead(II) Thiosaccharinates. Molecular Structure of Bis(thiosaccharinato)tetrakis(pyridine)dilead(II) and Thiosaccharinato-bis(1,10-phenantroline)lead(II) Thiosaccharinate (Completo, 2007)**

DIEGO R. PÉREZ , SUSANA H. TARULLI , OSCAR V. QUINZANI , JORGE DRISTAS , FACCIO, R. , LEOPOLDO SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, v.: 633 4-6 , p.:1066 - 1073, 2007

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442313

E-ISSN: 15213749

DOI: [10.1002/zaac.200700002](https://doi.org/10.1002/zaac.200700002)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/zaac.200700002/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Synthesis and characterization of stable room temperature bulk ferromagnetic graphite (Completo, 2006)**

H. PARDO , FACCIO, R. , F. M. ARAÚJO MOREIRA , O. F. DE LIMA , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Carbon, v.: 44 3 , p.:565 - 565, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / síntesis, caracterización Física y simulación

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00086223

DOI: [10.1016/j.carbon.2005.07.041](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.07.041)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008622305004793>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Multilevel ferromagnetic behavior of stable room temperature bulk magnetic graphite (Completo, 2005)**

ÁLVARO W. MOMBRÚ , H. PARDO , FACCIO, R. , O. F. DE LIMA , A.J.C. LANFREDI , C. A.

CARDOSO , E. R. LEITE , G. ZANELATTO , F. M. ARAÚJO MOREIRA

Physical Review B, v.: 71 R, p.:10040 - 10040, 2005

Palabras clave: Nanotechnology Magnetic Carbon

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / síntesis, caracterización Física y simulación

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10980121

E-ISSN: 1550235X

DOI: [10.1103/PhysRevB.71.100404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.100404)

<http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.71.100404>

Rapid Communication

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural Study in the (La, Nd)2-xSrxCuO4 system (Completo, 2004)**

ÁLVARO W. MOMBRÚ , S. IVANOV , H. PARDO , L. SUESCUN , FACCIO, R. , F. A. RABUFFETTI

Physica C Superconductivity, v.: 408 10 , p.:807 - 809, 2004

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / síntesis, caracterización Física y simulación

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09214534

DOI: [10.1016/j.physc.2004.03.139](https://doi.org/10.1016/j.physc.2004.03.139)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921453404005453>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Physical properties of single-crystalline fibers of the colossal-magnetoresistance manganite La<sub>0.7</sub>Ca<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> (Completo, 2003)**

C. A. CARDOSO , F. M. ARAÚJO MOREIRA , M. ANDREETA , A. C. HERNANDES , E. R. LEITE , O. F. DE LIMA , ÁLVARO W. MOMBRÚ , FACCIO, R.

Applied Physics Letters, v.: 83 15 , p.:3135 - 3137, 2003

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / síntesis, caracterización Física y simulación

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00036951

DOI: [10.1063/1.1619566](https://doi.org/10.1063/1.1619566)

<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/83/15/10.1063/1.1619566>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Chemoenzymatic synthesis of chiral enones from aromatic compounds (Completo, 2002)**

V. SCHAPIRO , G. SEOANE , G. CAVALLI , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Tetrahedron Asymmetry, v.: 13 22 , p.:2453 - 2459, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 09574166

DOI: [10.1016/S0957-4166\(02\)00682-1](https://doi.org/10.1016/S0957-4166(02)00682-1)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957416602006821>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**4,5,6,9-Tetramethoxy-11-phenyl-10-oxa-11-azatricyclo[7.2.2.0<sub>2,7</sub>]-trideca-2(7),3,5,12-tetraen-8-one (Completo, 2001)**

S. RUSSI , ÁLVARO W. MOMBRÚ , D. GAMENARA , E. DIAS , H. HEINZEN , P. MOYNA , FACCIO, R. , L. SUESCUN , RAÚL A. MARIEZCURRENA

Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online, v.: E57 5 , 2001

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 16005368

DOI: [10.1107/S1600536801006286](https://doi.org/10.1107/S1600536801006286)

<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S1600536801006286>

WEB OF SCIENCE™

## LIBROS

**Advanced Thermoelectric Materials ( Participación , 2019)**

M. ROMERO , MOMBRÚ, D , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W

Publicado

Editorial: Scrivener Publishing LLC , Beverly

Tipo de publicación: Investigación

DOI: [10.1002/9781119407348.ch11](https://doi.org/10.1002/9781119407348.ch11)

Referado

Escrito por invitación

Palabras clave: Thermoelectric thermal stability polymer nanocomposites

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Polímeros nanocompuestos

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN: 9781119407348

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9781119407348.ch11>

Capítulos:

Thermoelectric Properties and Thermal Stability of Conducting Polymer Nanocomposites: A Review

Organizadores: Chong Rae Park

Página inicial 467, Página final 492

**Cryopreservation / Book 2 ( Participación , 2011)**

M.C. SALDÍAS , G. SANCHEZ , P. MARTUCCI , MC. ACOSTA , I. ALVAREZ , FACCIO, R. , L. SUESCUN , M. ROMERO , A. W. MOMBRÚ

Publicado

Número de volúmenes: 1

Editorial: INTECH , Vienna, Austria

Palabras clave: XRD criopreservación

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Difracción de Rayos X

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN: 9799533077436

<http://www.intechopen.com/books>

Capítulos:

X Ray Diffraction: an approach to structural quality aspects of biological preserved tissues in tissue banks

Organizadores:

Página inicial , Página final

**The Carbon Nanoworld: From Graphene to Nanotubes ( Participación , 2011)**

FACCIO, R. , H. PARDO , F. M. ARAÚJO-MOREIRA , A. W. MOMBRÚ

Publicado

Número de volúmenes: 1

Editorial: Research Signpost , Kerala India

Tipo de publicación: Investigación

Escrito por invitación

Palabras clave: DFT, Nanotechnology, Graphite

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotechnology

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN: 9788178955162

Financiación/Cooperación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Capítulos:

Vacancies in 3-D graphite: electronic structure studies

Organizadores: Álvaro W. Mombrú & M. Terrones

Página inicial , Página final

**The Carbon Nanoworld: From Graphene to Nanotubes ( Participación , 2011)**

FACCIO, R. , A. W. MOMBRÚ

Publicado

Número de volúmenes: 1

Editorial: Research Signpost , Kerala, India

Tipo de publicación: Investigación

Referado

Escrito por invitación

Palabras clave: DFT, graphene, nanoribbon

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotechnology

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN: 9788178955162

Financiación/Cooperación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Capítulos:  
The Graphene nanoribbon: one of the strongest materials  
Organizadores: A. W. Mombrú & M. Terrones  
Página inicial , Página final

#### **Physics and Applications of Graphene - Theory ( Participación , 2010)**

FACCIO, R. , L. FERNANDEZ-WERNER, H. PARDO, CECILIA GOYENOLA, P. A. DENIS, A. W. MOMBRÚ  
Publicado  
Número de volúmenes: 1  
Editorial: INTECH, Vienna, Austria  
Tipo de publicación: Investigación  
DOI: [10.5772/13826](https://doi.org/10.5772/13826)  
Referado  
Escrito por invitación  
Palabras clave: DFT, graphene, nanoribbons  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotechnology  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN/ISBN: 9789533071527  
Financiación/Cooperación:  
Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay  
<http://www.intechopen.com/books/physics-and-applications-of-graphene-theory/mechanical-and-electroni>

Capítulos:  
Mechanical Properties of Graphene and Derived Nanostructures  
Organizadores: Dr. Sergey Mikhailov  
Página inicial 349, Página final 365

#### **Las Nanotecnologías en Uruguay ( Participación , 2010)**

FACCIO, R.  
Publicado  
Número de volúmenes: 1  
Edición: 1  
Tipo de publicación: Divulgación  
Escrito por invitación  
Palabras clave: Nanotecnología energía solar  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología & Energía Solar  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN/ISBN: 9789974006485  
Financiación/Cooperación:  
Comisión Sectorial de Investigación Científica / Cooperación, Uruguay  
[http://www.estudiosdeldesarrollo.net/administracion/docentes/documentos\\_personales/14370NT%20I](http://www.estudiosdeldesarrollo.net/administracion/docentes/documentos_personales/14370NT%20I)

Capítulos:  
Nanotecnología: ejemplos y aplicaciones en la utilización de energía solar  
Organizadores: Luis Foladori & Adriana Chiancone  
Página inicial 45, Página final 51

#### **PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS**

##### **Propiedades magnéticas de grafito con vacancias (2016)**

BENJAMÍN MONTENEGRO, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: VII Encuentro de Física y Química de Superficies  
Ciudad: Santa Fé  
Año del evento: 2016  
Palabras clave: Magnetismo DFT grafito

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Internet

<http://www.efyqs2016.santafe-conicet.gov.ar/index.php/efyqs/efyqs2016>

#### **Estructura y propiedades físicas en la serie (La-Sr,Nd-Ce)2CuO4 (2016)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , FACCIO, R. , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Año del evento: 2016

Palabras clave: Superconductivity

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/home>

Premio al mejor trabajo del congreso

#### **CARACTERIZACIÓN MEDIANTE DFT Y MICROSCOPIA RAMAN CONFOCAL DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA SINTETIZADAS A PARTIR DE PRODUCTOS NATURALES (2016)**

I. LÓPEZ CORRAL , A. GONZÁLEZ FÁ , FACCIO, R. , M. S. DI NEZIO , A. JUAN

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XVI Encuentro de Superficies y Materiales Nanoestructurados Nano 2016

Año del evento: 2016

Palabras clave: DFT Raman

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<http://nano2016.df.uba.ar>

#### **Caracterización de óxidos trimetálicos Ni-La-Sn como catalizadores para reformado de bioetanol con vapor de agua (2016)**

MAURICIO MUSSO , JUAN BUSSI , ANGIE QUEVEDO , FACCIO, R. , MARIANO ROMERO

Publicado

Resumen expandido

Evento: Internacional

Descripción: XXV Congreso Iberoamericano de Catálisis

Año del evento: 2016

Palabras clave: Raman bioetanol

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.cicat2016.org>

#### **NANOESTRUCTURAS DE ÓXIDO DE TITANIO PARA USO EN CELDAS SOLARES DE SENSIBILIZACIÓN ESPECTRAL (2016)**

FERNANDO PIGNANELLI , LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , FACCIO, R. , MARIANO ROMERO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: Celdas Solares nanomateriales y nanotecnología Energías Renovables

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Papel  
<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/home>

**Síntesis y estudio de NPs de ZnO y ZnO dopado con Ta (2016)**

DIEGO RICHARD , MARIANO ROMERO , FACCIO, R.  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: 101ª Reunión de la Asociación Física Argentina (AFA)  
Año del evento: 2016  
Palabras clave: DFT ZnO  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
<http://rnf.fisica.org.ar/index.php?title=Portada>

**Atomistic Simulation of Polymer Nanocomposites Based on Graphene Oxide Quantum Dots and Conductive Polymers (2016)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , FACCIO, R. , MARIANO ROMERO , MOMBRÚ, A. W.  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2016  
Palabras clave: graphene PANI  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Internet  
<http://quitel2016.org.uy/en/>

**First principles study of MoS<sub>2</sub>: electronic structure and phonons (2016)**

SANTIAGO VÁZQUEZ , FACCIO, R. , BENJAMÍN MONTENEGRO  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: Santiago  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2016  
Palabras clave: DFT MoS<sub>2</sub>  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Internet  
<http://quitel2016.org.uy/en/>

**Li-ion conductivity in modified conductive polymers (2016)**

FERNANDO PIGNANELLI , FACCIO, R. , MARIANO ROMERO , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2016  
Palabras clave: lithium battery Polymer  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Medio de divulgación: Internet  
<http://quitel2016.org.uy/en/>

**Enlace químico en complejos de Kubas de hidrógeno-platino en grafeno defectuoso (2016)**

SEBASTIAN PIRIZ , IGNACIO LÓPEZ-CORRAL , FACCIO, R. , ALFREDO JUAN

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: VII Encuentro de Física y Química de Superficies

Ciudad: Santa Fé

Año del evento: 2016

Palabras clave: DFT grafeno Hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Internet

<http://www.efyqs2016.santafe-conicet.gov.ar/index.php/efyqs/efyqs2016>

**Propiedades electrónicas en sistemas metal-porfirina (2016)**

FACCIO, R.

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: VII Encuentro de Física y Química de Superficies

Ciudad: Santa Fé

Año del evento: 2016

Escrita por invitación

Palabras clave: DFT Simulación Computacional nanomateriales y nanotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Internet

<http://www.efyqs2016.santafe-conicet.gov.ar/index.php/efyqs/efyqs2016>

**Estudio del efecto del Al en aleaciones tipo AB<sub>2</sub> de base Zr (2016)**

ERIKA TELIZ , FACCIO, R. , SANTIAGO VÁZQUEZ , CAMILA YATTAH , FERNANDO ZINOLA ,  
VERÓNICA DÍAZ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso de la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE)

Ciudad: Playa Jacó

Año del evento: 2016

Palabras clave: Hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.sibae2016.ucr.ac.cr>

**Efecto del aluminio y molibdeno en el almacenamiento electroquímico de hidrógeno en aleaciones LaNi<sub>5</sub> (2016)**

ERIKA TELIZ , JOAQUÍN DIEZ , FACCIO, R. , SANTIAGO VÁZQUEZ , VERÓNICA DÍAZ ,  
FERNANDO ZINOLA<sup>1</sup>

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso de la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE)

Ciudad: Playa Jacó

Año del evento: 2016

Palabras clave: Hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.sibae2016.ucr.ac.cr>

#### **Estudio electroquímico y estructural de ZrCr<sub>1-x</sub>NiMox (2016)**

ERIKA TELIZ , FACCIIO, R. , FABRICIO RUIZ , FERNANDO ZINOLA , VERÓNICA DÍAZ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso de la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE)

Ciudad: Playa Jaco

Año del evento: 2016

Palabras clave: Hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.sibae2016.ucr.ac.cr>

#### **Estudio Estructural y Electrónico en Fases de Laves Hidrogenadas (2016)**

ERIKA TELIZ , SANTIAGO VÁZQUEZ , FACCIIO, R. , FERNANDO ZINOLA , VERÓNICA DÍAZ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso de la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE)

Ciudad: Playa Jacó

Año del evento: 2016

Palabras clave: Hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.sibae2016.ucr.ac.cr>

#### **ESFUERZOS HACIA LA SISTEMATIZACIÓN DE LA CARACTERIZACIÓN DE NANOTUBOS MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS X (2016)**

LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , FERNANDO PIGNANELLI , FACCIIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: nanomateriales y nanotecnología Energías Renovables

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/>

#### **PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE NANOCOMPÓSITOS PANI-GQD (2016)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , MARIANO ROMERO , FACCIIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: nanomateriales y nanotecnología nanocompuestos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/home>

#### **CARACTERIZACIÓN Y DESEMPEÑO ELECTROQUÍMICO DE NANOMATERIALES BASADOS EN LiFePO<sub>4</sub> COMO CÁTODOS PARA BATERÍAS DE ION-LITIO (2016)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , FERNANDO PIGNANELLI , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , ERIKA TELIZ , VERÓNICA DÍAZ , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: nanomateriales y nanotecnología Energías Renovables litio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/home>

#### **Caracterización Estructural del Complejo Cu(SCN)TEA (2016)**

FACCIO, R. , ENRIQUE DALCHIELE , KATHERINE ÁLVAREZ , MARISOL TEJOS , DANIEL RAMÍREZ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo Encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: Celdas Solares

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/home>

#### **ESTUDIO DE LA CRISTALIZACIÓN DE VIDRIOS OXIFLUORUROS PARA LA OBTENCIÓN DE CONVERTIDORES ESPECTRALES (2016)**

ROMINA KEUCHKERIAN , MAURICIO RODRÍGUEZ , FACCIO, R. , LEOPOLDO SUESCUN , HEINKEL BENTOS PEREIRA , LAURA FORNARO

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: Energías Renovables

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/2encuentrorucr/home>

#### **Síntesis, Caracterización y Simulación de Nanomateriales con Aplicaciones en Energía (2015)**

FACCIO, R. , LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Escrita por invitación

Palabras clave: SOLAR CELLSTiO2 nanotubes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Papel

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Relacion estructural de las tasas I y I' en la serie La<sub>2</sub>-xNd<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> (2015)**

DOMINIQUE MOMBRÚ, MARIO MACÍAS, LEOPOLDO SUESCUN, FACCIÓ, R., HELENA PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Microscopia Raman Confocal aplicada a la caracterización de nanotubos de Óxido de Titanio (2015)**

FERNANDO PIGNANELLI, LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER, MARIANO ROMERO, DOMINIQUE MOMBRÚ, FACCIÓ, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: Raman nanotubos óxido de Titanio TiO<sub>2</sub>

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Aplicación de tecnología innovadora para la formulación de nuevos antihelmínticos (2015)**

MARÍA ELISA MELIAN, SANTIAGO PALMA, FACCIÓ, R., LAURA DOMÍNGUEZ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Químico

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: Raman formulaciones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Transporte en sistemas grafénicos con vacantes (2015)**

BENJAMÍN MONTENEGRO, FACCIÓ, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: graphene transport

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Estructura Electrónica de Nanocintas de Carbono dopadas con Boro, Nitrógeno y Oxígeno (2015)**

SEBASTIAN PIRIZ, FACCIÓ, R., HELENA PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: Carto Encuentro Nacional de Química  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: graphene Electronic Structure  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Preparación y caracterización de nanomateriales basados en LiFePO<sub>4</sub> como cátodos para baterías de ión-litio (2015)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , FERNANDO PIGNANELLI , MARIANO ROMERO , SANTIAGO VÁZQUEZ , FACCIO, R. , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: Li-ion Batteries Olivine  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Estudio de la microestructura y transporte magnético en nanocompuestos del tipo manganita-polímero (2015)**

MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , HELENA PARDO , MILTON TUMELERO , CRISTIANI CAMPOS PLÁ CID , ANDRÉ PASA , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: Manganite magnetoresistance  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Preparación de materiales grafénicos por métodos químicos y físicos (2015)**

DOMINIQUE MOMBRÚ , IGNACIO LABORDA , ANALÍA CASTRO , SEBASTIAN PIRIZ , MARIANO ROMERO , FACCIO, R. , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: graphene  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

**Estudio ab initio de formación de vacancias y barreras de migración de oxígeno en los materiales Ba<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Fe<sub>1-x</sub>Cu<sub>x</sub>O<sub>3-d</sub> (2015)**

SANTIAGO VÁZQUEZ , FACCIO, R. , LEOPOLDO SUESCUN

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: DFT SOFC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

#### **Características estructurales y vibracionales de titanatos laminares de composición**

##### **[H,Na]2TinO2n+1.yH2O (n=2, 3) (2015)**

LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER, FACCIO, R. , BENJAMÍN MONTENEGRO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: TiO2 nanostructures

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy>

#### **Electronic Structure of Edge Doped Graphene Nanoribbons (2015)**

SEBASTIAN PIRIZ, FACCIO, R. , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VI Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations.

Ciudad: La Plata/Argentina

Año del evento: 2015

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://viwnm.fisica.unlp.edu.ar>

#### **First principles study of MoS2: electronic structure and phonons (2015)**

SANTIAGO VÁZQUEZ , FACCIO, R. , BENJAMÍN MONTENEGRO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VI Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations.

Ciudad: La Plata/Argentina

Año del evento: 2015

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<http://viwnm.fisica.unlp.edu.ar>

#### **Electronic Transport in Multivacancy Graphene Systems (2015)**

BENJAMÍN MONTENEGRO , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VI Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations.  
Ciudad: La Plata/Argentina  
Año del evento: 2015  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
<http://vivnm.fisica.unlp.edu.ar>

#### **Estudio del Gradiente de campo eléctrico de impurezas Cd en la superficie (111) del In metálico (2015)**

GERMÁN N. DARRIBA , FACCIO, R. , MARIO RENTERÍA  
Publicado  
Resumen  
Evento: Local  
Descripción: 100ª Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina  
Ciudad: San Luis/ Argentina  
Año del evento: 2015  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros

#### **Estudio Teórico y Experimental de Diodos moleculares (2015)**

FACCIO, R.  
Publicado  
Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: XIV Reunión de la Sociedad Uruguaya de Física  
Ciudad: San José / Uruguay  
Año del evento: 2015  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros

#### **ESTUDIO DFT DE LA ADSORCIÓN DE GLIFOSATO SOBRE GOETITA (2015)**

IGNACIO LÓPEZ-CORRAL , SILVINA PIRILLO , FACCIO, R. , ALFREDO JUAN , MARCELO AVENA  
Publicado  
Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: XIX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica  
Ciudad: Buenos Aires / Argentina  
Año del evento: 2015  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros

#### **INFLUENCIA DEL Mo EN LA CAPACIDAD DE ALMACENAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE HIDRÓGENO DE ALEACIONES ZrCr<sub>1-x</sub>MoxNi. (2014)**

ERIKA TELIZ , FABRICIO RUIZ , FACCIO, R. , PABLO S. MARTÍNEZ , FERNANDO ZINOLA , VERÓNICA DÍAZ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: El XXI Congreso de la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE)  
Ciudad: La Serena / Chile  
Año del evento: 2014  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Medio de divulgación: Otros  
<http://www.sibae2014.cl>

### **Oxido de manganeso másico y soportado sobre PILC-AL para la combustión total de propano (2014)**

CAROLINA DE LOS SANTOS , MARTÍN TORRES , ANGIE QUEVEDO , FACCIO, R. , MARTA SERGIO , JORGE CASTIGLIONI

Publicado

Resumen expandido

Evento: Internacional

Descripción: XXIV Congreso Iberoamericano de Catálisis, CICat 2014

Ciudad: Medellín, Colombia

Año del evento: 2014

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

[http://issuu.com/cesetudea/docs/primer\\_circular\\_-\\_cicat\\_2014](http://issuu.com/cesetudea/docs/primer_circular_-_cicat_2014)

### **Cálculos mecano-cuánticos en semiconductores (2013)**

A. M. MARTÍNEZ , M. ROSARIO SORIANO , FACCIO, R. , A TRIGUBÓ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica de la Asociación Argentina de Investigación Físicoquímica (AAIFQ)

Ciudad: Rosario, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT semiconductores

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

### **CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES MECÁNICAS DE LOS SEMICONDUCTORES II-VI: Cd<sub>1-y</sub>Zn<sub>y</sub>Te (2013)**

ANA M. MARTÍNEZ , MARÍA R. SORIANO , FACCIO, R. , ALICIA B. TRIGUBÓ

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: 13er Congreso Internacional en Ciencia y Tecnología de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2013

Ciudad: Misiones, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: semiconductores cadmio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

### **Electronic Structure of Cd impurities in (001) $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slabs: a local environment study (2013)**

G. N. DARRIBA , FACCIO, R. , M. RENTERIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 21th Latin American Symposium On Solid State Physics (SLAFES XXI)

Ciudad: Villa de Loyva, Colombia

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS DE FÓRMULA RE<sub>2/3</sub>-yBi<sub>y</sub>TiO<sub>3</sub> (RE: La, Pr Y Nd) PARA ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA (2013)**

L. DONATTI , L. FERNANDEZ-WERNER , H. PARDO , A. W. MOMBRÚ , FACCIO, R.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: I Reunión Latinoamericana de Cristalografía IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: Nanotecnología batería de litio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Medio de divulgación: Papel

**RESOLUCIÓN ESTRUCTURAL DEL COMPLEJO  $[\{Ca(H_2O)_6\}\{CaGd(oda)_3\}_2] \cdot 4H_2O$  POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X EN MONOCRISTAL Y COMPARACIÓN DE RESULTADOS CON BASE DE DATOS CRISTALOGRÁFICA (2013)**

GUZMÁN PEINADO , LEOPOLDO SUESCUN , FACCIO, R. , JULIA TORRES , CARLOS KREMER , ROBERT BURROW

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: I Reunión Latinoamericana de Cristalografía IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: cristalografía

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

**Caracterización de Ba<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.8</sub>Cu<sub>0.2</sub>O<sub>3-δ</sub> para IT-SOFC (2013)**

S. VÁZQUEZ , L. SUESCUN , FACCIO, R. , A. SERQUIS , M. ROMERO , J. BASBUS , F. NAPOLITANO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: I Reunión Latinoamericana de Cristalografía IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: celdas SOFC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Medio de divulgación: Papel

**Propiedades estructurales y electrónicas de impurezas Cd en la superficie (001) del semiconductor (2013)**

DARRIBA G N , FACCIO, R. , RENTERÍA M

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 98a Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina

Ciudad: Bariloche, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

**NUEVOS MATERIALES COMO SISTEMAS DE ABSORCIÓN DE ENERGÍA EN EL INFRARROJO (2013)**

BENJAMÍN MONTENEGRO , FACCIO, R. , MOMBRÚ, A. W.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXI Jornadas Jóvenes Investigadores AUGM

Ciudad: Corrientes, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT Celdas Solares

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura

Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

**ENLACE QUÍMICO EN COMPLEJOS SUPERFICIALES DE GLIFOSATO Y FOSFATO SOBRE GOETITA (2013)**

IGNACIO LÓPEZ CORRAL , FACCIO, R. , ALFREDO JUAN , MARCELO AVENA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Ciudad: Rosario, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: glifosato

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear /

Medio de divulgación: Papel

**Influencia del contenido de Mo en la microestructura y en las propiedades de almacenamiento electroquímico de hidrógeno de aleaciones  $\text{LaNi}_{3,6}\text{Co}_{6,7}\text{Mn}_{0,3-x}\text{Mo}_x\text{Al}_{10,3}$  ( $x=0,0,1,0,25$ ) (2013)**

HUMANA RM, DÍAZ V, TELIZ E, ZINOLA F, RUIZ FC, MARTÍNEZ PS, FACCIO, R. , ANDREASEN G, CASTRO EB, VISINTIN A

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 5to Congreso Nacional y 4to Iberoamericano sobre Hidrógeno y fuentes sustentables de energía

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: celdas hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica /

Medio de divulgación: Papel

**Structural characterization of  $\text{LnBaMnFeO}_{6-d}$  series with  $\text{Ln}=\text{La, Nd, Pr}$  and  $d \sim 0.5$  (2013)**

M ROMERO , FACCIO, R. , L SUESCUN , H PARDO , AW MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Activity report 2012, LNLS

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: manganitas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Medio de divulgación: Papel

**PIGMENTOS MINERALES RECUPERADOS EN EL SITIO PUERTO LA TUNA PROVENIENTES DE LOS**

**CONTEXTOS TARDÍOS DE OCUPACIÓN: CARACTERIZACIÓN ESPECTROSCÓPICA Y ANÁLISIS MICROSCÓPICO DE RASTROS (2013)**

LAURA BEOVIDE , HELENA PARDO , FACCIO, R. , MARCO LORENZO , MARIELA PISTÓN

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XVIII Congreso Nacional de Arqueología Argentina

Ciudad: La Rioja, Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: arqueología DRX

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Arqueología

Medio de divulgación: Papel

**Resolución estructural y comparación de la calidad de refinamientos de monocristal y polvo convencional y de sincrotrón para el MOF cúbico  $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_6\{\text{CaGd}(\text{oda})_3\}_2]$  (2013)**

GUZMÁN PEINADO , LEOPOLDO SUESCUN , FACCIO, R. , JULIA TORRES , CARLOS KREMER

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 3.0

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: cristalografía

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

**Ba<sub>0.55</sub>Sr<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.8</sub>Cu<sub>0.2</sub>O<sub>3-δ</sub> como cátodo para IT-SOFC (2013)**

SANTIAGO VÁZQUEZ , JUAN BASBUS , MARIANO ROMERO , FEDERICO NAPOLITANO ,  
ADRIANA SERQUIS , FACCIO, R. , LEOPOLDO SUESCUN

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 3.0

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT celdas SOFC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Medio de divulgación: Papel

**Evidencias de superexchange magnético del tipo Mn<sup>3+</sup>-O-Fe<sup>3+</sup> en manganita de Praseodimio (2012)**

H. PARDO , M. ROMERO , FACCIO, R. , S. VÁZQUEZ , I. LABORDA , N. CASAÑ-PASTOR , L.  
SUESCUN , L. CASAS , E. MOLLINS , A. W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XIII Reunión de la Sociedad Uruguaya de Física

Ciudad: Maldonado, Uruguay

Año del evento: 2012

Publicación arbitrada

Palabras clave: Magnetismo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
magnetismo

Medio de divulgación: Papel

**Estructura y propiedades magnéticas de una manganita con alto contenido de hierro (2012)**

M. ROMERO , FACCIO, R. , H. PARDO , L. SUESCUN , S. VÁZQUEZ , L. FERNANDEZ , L. CASAS , E.

MOLLINS, N. CASAÑ-PASTOR

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Simposio Uruguayo de Celebración de 100 años de la Cristalografía Moderna

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2012

Publicación arbitrada

Palabras clave: Magnetismo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / magnetismo

Medio de divulgación: Papel

#### **CALCULOS DE PROPIEDADES ELECTRONICAS Y ESTRUCTURALES DE SEMICONDUCTORES II-VI (2012)**

A. M. MARTÍNEZ, FACCIO, R., M. R. SORIANO, A.B. TRIGUBÓ, N. RABINOVICH

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 2º Encuentro Programa MaterialesUTN Reunión Matte@r 2012

Ciudad: Mendoza, Argentina

Año del evento: 2012

Publicación arbitrada

Palabras clave: semiconductores

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

#### **Estudio estructural y electrónico del polimorfo TiO<sub>2</sub>(B) evaluación de la absorción de ácido fórmico sobre las superficies (001) y (100) mediante cálculos DFT (2011)**

FACCIO, R.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Segunda Reunión Conjunta SUF- AFA

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT Nanotechnology SOLAR CELLS TiO<sub>2</sub>

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

#### **Síntesis, caracterización estructural y composicional de (2011)**

MARIANO ROMERO, SANTIAGO VÁZQUEZ, MAGDALENA IRAZOQUI, SELVA CORA, IGNACIO LABORDA, LUCIANA FERNÁNDEZ, JORGE CASTIGLIONI, LEOPOLDO SUESCUN, FACCIO, R., HELENA PARDO, MOMBRÚ, A. W.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Segunda Reunión Conjunta AFA-SUF

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: manganitas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Medio de divulgación: Papel

#### **Nuevos sistemas moleculares para absorción espectral en el infrarrojo cercano (2011)**

MOMBRÚ, A. W., FACCIO, R., HELENA PARDO

Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: Segunda Reunión Conjunta AFA SUF  
Ciudad: Montevideo, Uruguay  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: DFT Fullerenos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Medio de divulgación: Papel

**EFFECTOS DE TAMAÑO EN LAS PROPIEDADES VIBRACIONALES DE NANOPARTÍCULAS DE NIQUEL (2011)**

MIGUEL NAPAL , ABEL MALDONADO , FACCIO, R. , SUSANA RAMOS DE DEBIAGGI  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: Segunda Reunión Conjunta AFA SUF  
Ciudad: Montevideo, Uruguay  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: nanopartículas de níquel  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Medio de divulgación: Papel

**ESTUDIO TEORICO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRONICAS DE LOS SEMICONDUCTORES  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  ( $0 \leq x \leq 0,1$ ) Y  $ZnTe$  (2011)**

ANA MARÍA MARTÍNEZ , FACCIO, R. , R SORIANO , A TRIGUBÓ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica  
Ciudad: Córdoba, Argentina  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: semiconductores  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Medio de divulgación: Papel

**Titania atomic wires and tubes derived from  $TiO_2(B)$  (001): a DFT study (2011)**

LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , FACCIO, R. , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: 4th Workshop on novel methods for electronic structure calculations  
Ciudad: La Plata, Argentina  
Año del evento: 2011  
Palabras clave: óxido de titanio  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT  
Medio de divulgación: Papel

**Sized and doping effect in graphene nanoribbons (2011)**

SEBASTIAN PIRIZ , FACCIO, R. , LUCIANA FERNÁNDEZ , HELENA PARDO , RUBEN BEHAK , MOMBRÚ, A. W.  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: 4th Workshop on novel methods for electronic structure calculations  
Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: nanocintas de carbono  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT  
Medio de divulgación: Papel

**Structural characterization and magnetic properties of a new Fe substituted manganites PBMFO<sub>5.5+δ</sub>. (2011)**

M. ROMERO , S. VÁZQUEZ , M. Irazoqui , S. CORA , I. LABORDA , L. FERNANDEZ-WERNER , J. CASTIGLIONI , N. CASAÑ-PASTOR , H. PARDO , FACCIO, R. , L. SUESCUN , A. W. MOMBRÚ  
Publicado  
Completo  
Evento: Nacional  
Descripción: 4th Workshop on novel methods for electronic structure calculations  
Ciudad: La Plata, Argentina  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: manganitas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT  
Medio de divulgación: Papel

**Depósito de porfirinas modificadas sobre superficies de Cu(110) y Cu<sub>3</sub>N/Cu(110) (2011)**

FACCIO, R. , VINICIUS ZOLDAN , ANDRÉ PASA , JÜRGEN KIRSCHNER  
Publicado  
Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: ENAQUI  
Ciudad: Montevideo, Uruguay  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: DFT porfirinas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT  
Medio de divulgación: CD-Rom

**Construcción de estructuras de dióxido de titanio de alta relación de aspecto a escala nanométrica y subnanométrica utilizando como precursores nano hojas de TiO<sub>2</sub>(B) de orientación (001) (2011)**

LUCIANA FERNÁNDEZ-WERNER , FACCIO, R. , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: ENAQUI  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: óxidos de titanio nanotecnología  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT  
Medio de divulgación: CD-Rom

**Evaluación de Sistemas Fullerenos/Metal/PAH para la absorción en el infrarrojo cercano (2011)**

MOMBRÚ, A. W. , FACCIO, R. , HELENA PARDO  
Publicado  
Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: ENAQUI  
Ciudad: Montevideo, Uruguay  
Año del evento: 2011  
Publicación arbitrada

Palabras clave: fullerenos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: CD-Rom

**ESTUDIO TEORICO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRONICAS DE LOS SEMICONDUCTORES  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  ( $0 < x < 0.1$ ) Y ZnTe (2011)**

ANA M. MARTÍNEZ, FACCIO, R., M. R. SORIANO, A. B. TRIGUBÓ

Publicado

Resumen expandido

Evento: Nacional

Descripción: XVII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT, optical gap,

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / estructura electrónica

Medio de divulgación: Papel

**Investigation of the coupling of Tetraphenylporphyrin Molecules on Cu(110) and Cu<sub>3</sub>N-Cu(110) surfaces (2011)**

V. ZOLDAN, CHUNLEI GAO, FACCIO, R., ANDRE AVELINO PASA, JÜRGEN KIRSCHNER

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 7th Brazilian German Workshop on Applied Surface Science 2011

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT Nanotechnology

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: Papel

**PREPARACION DE NUEVOS COMPLEJOS DE RENIO(II), POTENCIALES BUILDING-BLOCKS PARA LA SINTESIS DE COMPLEJOS POLINUCLEARES (2011)**

MARIO PACHECO, ALICIA CUEVAS, FACCIO, R., MOMBRÚ, A. W., CARLOS KREMER

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XVII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: Renio complejo polinuclear

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear /

Medio de divulgación: Papel

**Propiedades Mecánicas de Nanocintas de Carbono dopadas en Borde (2011)**

SEBASTIAN PIRIZ, FACCIO, R., LUCIANA FERNÁNDEZ, HELENA PARDO, RUBEN BEHAK, MOMBRÚ, A. W.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: nanocintas de carbono

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT

Medio de divulgación: CD-Rom

Financiación/Cooperación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Cooperación, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Cooperación, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Cooperación, Uruguay

Institución del exterior / Apoyo financiero,

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Cooperación, Uruguay

Institución del exterior / Cooperación,

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica / Apoyo financiero, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Otra, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Otra, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Otra, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero, Uruguay

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero, Uruguay

#### **Graphene & Graphene Nanoribbons: Electronic Structure and Mechanical Properties (2010)**

FACCIO, R., P. A. DENIS, CECILIA GOYENOLA, LUCIANA FERNÁNDEZ, H. PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Spring College on Computational Nanoscience

Ciudad: Trieste Italia

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT Nanoscience

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotechnology

[http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/full\\_display.php?smr=0&ida=a09148](http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/full_display.php?smr=0&ida=a09148)

#### **MODULATION OF THE PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF HETEROPOLYNUCLEAR ASSEMBLIES CONTAINING LANTHANIDE IONS (2009)**

C. KREMER, J. TORRES, L. SUESCUN, FACCIO, R., A. W. MOMBRÚ, S. DOMÍNGUEZ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 13th IUPAC International Symposium on MacroMolecular Complexes

Ciudad: Concepción CHILE

Año del evento: 2009

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / MacroMolecular

Complexes

Medio de divulgación: Papel

#### **Electronic Structure of TiO<sub>2</sub> and titanates: a systematic study (2009)**

LUCIANA FERNÁNDEZ, FACCIO, R., HELENA PARDO, CECILIA GOYENOLA, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Computational Nanoscience for Renewable Energy Solutions  
Ciudad: Helsinki, Finland  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: DFT, CELDAS SOLARES (DSSC)  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
CÁLCULOS POR PRIMEROS PRINCIPIOS  
Medio de divulgación: Papel

**PREPARACIÓN Y ESTUDIO DE BIOMATERIALES DOPADOS CON DIOXIDO DE TITANIO: MICRO Y NANOESTRUCTURA (2009)**

CECILIA GOYENOLA , FACCIO, R. , HELENA PARDO , LUCIANA FERNÁNDEZ , ALEJANDRA SZABO , JUAN MORANDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: V Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía / I Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía  
Ciudad: Misiones, ARGENTINA  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: NANOTECNOLOGIA, DRX, BIOMATERIALES  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / BIOMATERIALES, NANOTECNOLOGIA  
Medio de divulgación: Papel

**Lattice distortions in oxygen deficient SrMnO<sub>y</sub> compounds with disordered vacancies. (2009)**

LEOPOLDO SUESCUN , BOGDAN DABROWSKI , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Completo  
Evento: Internacional  
Descripción: Reuniao Anual de Usuarios do LNLS  
Ciudad: Sao Paulo, Brasil  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / ciencia de materiales, celdas combustible  
Medio de divulgación: Papel

**Preparación biomimética de hidroxiapatitas nanoestructuradas (2009)**

HELENA PARDO , FACCIO, R. , IRIS MIRABALLES , GERALDINE RIMSKY , CECILIA GOYENOLA , JUAN A. MORANDO , ALEJANDRA SZABO , LUCIANA FERNÁNDEZ , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: III. Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI) - VIII. Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI).  
Ciudad: Granada, España  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: hidroxiapatitas, biomimético  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / ciencia de materiales, biomateriales, nanotecnología

**Mechanical and electronic features of carbon nanostructures (2009)**

FACCIO, R. , PABLO A. DENIS , HELENA PARDO , CECILIA GOYENOLA , LUCIANA FERNÁNDEZ , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Completo  
Evento: Internacional

Descripción: III Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations  
Ciudad: La Plata, Argentina  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: DFT, nanotecnología  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación,  
DFT, nanomateriales  
Conferencista invitado

**ORDENAMIENTO DE VACANCIAS DE OXÍGENO EN EL SISTEMA La1-XSrXMnOY (2009)**

LEOPOLDO SUESCUN , FACCIÓ, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ , B. DABROWSKI , J. MAIS , S. REMSEN , J. D. JORGENSEN  
Publicado  
Completo  
Evento: Regional  
Descripción: IV Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía  
Ciudad: Bahía Blanca, Argentina  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Celdas Combustibles, Difracción Rayos X  
Medio de divulgación: Papel

**EXTENDED CAPABILITIES IN POWDER DIFFRACTION AT THE Centro de Análisis por Difracción de Rayos X (CADIFRAX) IN MONTEVIDEO URUGUAY (2009)**

FACCIÓ, R. , A. W. MOMBRÚ , HELENA PARDO , L. SUESCUN  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: IV Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía  
Ciudad: Bahía Blanca- Argentina  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: XRD X ray Powder diffraction  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Cristalografía  
Medio de divulgación: Papel

**DETERMINACIÓN DEL ANCHO DE BANDAS DE ENERGÍAS PROHIBIDAS DE LA SUPERCELDA DE CdZnTe A PARTIR DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS (2009)**

ANA M. MARTÍNEZ , M. R. SORIANO , FACCIÓ, R. , A. B. TRIGUBÓ  
Publicado  
Completo  
Evento: Regional  
Descripción: SAM/CONAMET  
Ciudad: BUENOS AIRES, ARGENTINA  
Año del evento: 2009  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / CÁLCULOS POR PRIMEROS PRINCIPIOS  
Medio de divulgación: Papel

**NUEVO TIOSACARINATO DINUCLEAR DE Cu CON 2-MERCAPTOBENZIMIDAZOL. [Cu2(tsac)2(SBim)2CH3CN] (2009)**

MARIANA DENNEHY , OSCAR QUINZANI , FACCIÓ, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: XVI Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica  
Ciudad: Salta

Año del evento: 2009

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Magnetismo

Medio de divulgación: Papel

**Crystallographic structure of the trichlorobenzazole (TCBZ; 6-chloro-5-(2,3-dichlorophenoxy)-2-methylthiobenzimidazole) (2009)**

FACCIO, R., BEATRIZ MUNGUÍA, LEOPOLDO SUESCUN, LAURA DOMÍNGUEZ, EDUARDO MANTA, HELENA PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen expandido

Evento: Regional

Descripción: II Latin-American Symposium on Polymorphism and Crystallization in Drugs and Medicines

Ciudad: Sao Pedro / Sao Paulo / Brasil

Año del evento: 2009

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Polimorfismo

Medio de divulgación: Internet

<http://www.fisica.ufc.br/lapolc/>

**Synthesis and crystal structure of Rhenium(II) nitrosyl complexes containing diazine type ligands (2008)**

MARIO PACHECO, LUCÍA GEIS, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ, ALICIA CUEVAS, CARLOS KREMER

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: The XIV Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry (BMIC2008) will be held in parallel with the I Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC2008)

Ciudad: Foz do Iguaçu, PR, Brazil

Año del evento: 2008

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Estructura

Cristalográfica

Medio de divulgación: Otros

**Synthesis and Crystal Structure of the New Binuclear Copper(II) Complex of the Antiinflammatory Drug Fenoprofen (2008)**

M.A. AGOTEGARAY, O.V. QUINZANI, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: The XIV Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry (BMIC2008) will be held in parallel with the I Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC2008), from August 31 to September 4, 2008, in Foz do Iguaçu, PR, Brazil

Ciudad: Foz do Iguaçu, PR, Brazil

Año del evento: 2008

Anales/Proceedings: Synthesis and Crystal Structure of the New Binuclear Copper(II) Complex of the Antiinflammatory Drug Fenoprofen

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Caracterización Estructural

Medio de divulgación: Papel

<http://www.iq.unesp.br/bmic2008/>

**Lattice distortions in oxygen deficient SrMnO<sub>y</sub> 2.8 < y < 3 compounds with disordered vacancies (2008)**

L. SUESCUN, FACCIO, R., B. DABROWSKI, A. W. MOMBRÚ

Publicado  
Completo  
Evento: Internacional  
Descripción: Activity Report 2008 LNLS  
Año del evento: 2008  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: XRD  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Caracterización EStructural por XRD  
Medio de divulgación: Papel  
www.lnls.br

**ACTIVIDAD CATALÍTICA DE DISTINTOS CATALIZADORES DE NÍQUEL PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE BIOETANOL (2008)**

J. BUSSI, N. BESPALKO, S. VIEGA, A. AMAYA, FACCIO, R.

Publicado  
Completo  
Evento: Regional  
Descripción: IV Encuentro Regional de Ingeniería Química 5-7 de junio de 2008. Montevideo Uruguay  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2008  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Catalizadores - cristalografía  
Medio de divulgación: Papel

**Synthesis and theoretical and experimental study of new ceramics and nano-structured materials (2007)**

FACCIO, R., H. PARDO, L. SUESCUN, P. A. DENIS, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations  
Ciudad: La Plata, Argentina  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación por "Density Functional Theory"  
Medio de divulgación: Internet  
<http://www2.tandar.cnea.gov.ar/FPLO/>  
Electronic Structure Calculations. Presentación Oral

**Caracterización de catalizadores Ni-La-Zr para el reformado de Bioetanol (2007)**

J. BUSSI, N. BESPALKO, S. VIEGA, A. AMAYA, FACCIO, R.

Publicado  
Resumen expandido  
Evento: Regional  
Descripción: XV Congreso Argentino de Catálisis- 4º Congreso de catálisis del MERCOSUR  
Ciudad: La Plata, Argentina  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / catalizadores - caracterización  
Medio de divulgación: Papel

**Evaluación de PILC-Al dopadas con vanadio en la deshidrogenación oxidativa de propano (2007)**

L. LATRÓNICA, L. YERMAN, FACCIO, R., J. CASTIGLIONI, M. SERGIO

Publicado  
Resumen expandido

Evento: Internacional  
Descripción: XV Congreso Argentino de Catálisis- 4º Congreso de catálisis del MERCOSUR  
Ciudad: La Plata, Argentina  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / catalizadores - caracterización  
Medio de divulgación: Papel

**Caracterización de polimorfos de interés farmacéutico por difracción de rayos X (2007)**

FACCIO, R., H. PARDO, L. SUESCUN, ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen expandido  
Evento: Regional  
Descripción: Simposio Latino Americano de Polimorfismo y Cristalización en Fármacos y Medicamentos  
Ciudad: Fortaleza, Ceará  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Polimorfismo Cristalografía  
Medio de divulgación: Internet

**Study of metallic clusters in carbon nanofoam (2007)**

B. AYAN, N. D. KHAN, ÁLVARO W. MOMBRÚ, H. PARDO, FACCIO, R.  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: 8th Biennial International Workshop Fullerenes and Atomic Clusters IWFA 2007  
Ciudad: St. Petersburg, Russia  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales  
Medio de divulgación: Papel

**Ab initio study of the influence of adsorbed atoms on vacancy-induced magnetic moments in graphene sheets (2007)**

R. YOSHIKAWA OEIRAS, F. M. ARAÚJO MOREIRA, M. VERISSIMO ALVES, FACCIO, R., H. PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: XXX Encontro Nacional de Física da Materia Condensada  
Ciudad: Sao Lourenco, Minas Gerais, Br  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis, Caracterización y simulación de nuevos materiales  
Medio de divulgación: Otros

**Cryopreserved allograft vascular tissues: A structural analysis by X-ray diffraction (2007)**

H. PEREZ CAMPO, M. SALDIAS, D. MACHIN, O. ALVAREZ, L. SUESCUN, FACCIO, R., ÁLVARO W. MOMBRÚ, I. ALVAREZ  
Publicado  
Resumen  
Evento: Regional  
Descripción: III ENCUENTRO LATINOAMERICANO DE BANCOS DE TEJIDOS  
Ciudad: CANCUN, QUINTANA ROO, MEXICO  
Año del evento: 2007  
Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Biomateriales - cristalografía

Medio de divulgación: Papel

Este trabajo recibió el premio al Segundo Lugar del congreso

**Structural and magnetic characterization of the  $Y_{1-x}Nd_xBaCuCoO_{5+d}$  series (2007)**

FACCIO, R., L. SUESCUN, H. PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Latin American Workshop on Applications of Powder Diffraction

Ciudad: Campinas, Brasil

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

**Caracterización física y estructural de la serie  $Y_{1-x}Nd_xBaCuCoO_{5+d}$  (2007)**

FACCIO, R., LEOPOLDO SUESCUN, H. PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Reunión Anual de la Sociedad Uruguaya de Física

Ciudad: Colonia

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura y Magnetismo de Sistemas Cerámicos

Medio de divulgación: Papel

**Producción de hidrógeno mediante reformado de bioetanol con catalizadores Ni-La-Zr (2006)**

J. BUSSI, N. BESPALCO, FACCIO, R., M. BENITO, R. PADILLA, L. DAZA

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: II CONGRESO NACIONAL DE PILAS DE COMBUSTIBLE CONAPPICE

Ciudad: Madrid España

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / catalizadores - caracterización

Medio de divulgación: Papel

**A theoretical model for bulk crystalline magnetic carbon (2006)**

FACCIO, R., H. PARDO, P. A. DENIS, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen expandido

Evento: Regional

Descripción: V Congreso Iberoamericano de Sensores

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis, Caracterización y simulación de nuevos materiales

Medio de divulgación: Papel

Este trabajo recibió el premio al Mejor póster del congreso.

**Comparative study of fiber ordering in aorta and carotid arteries by x-ray diffraction (2005)**

H. PEREZ CAMPO , M. SALDIAS , W. SILVA , D. MACHIN , O. ALVAREZ , L. SUESCUN , FACCIIO , R. ,  
ÁLVARO W. MOMBRÚ , I. ALVAREZ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 4th World Congress on Tissue Banking

Ciudad: Río de Janeiro, Brasil

Año del evento: 2005

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Biomateriales -  
cristalografía

Medio de divulgación: Otros

Este trabajo recibió el premio al Mejor poster del congreso

#### **Síntesis y caracterización de nuevos complejos de indio y tiosacarina (2005)**

D. R. PEREZ , S. H. TARULLI , O. V. QUINZANI , FACCIIO , R. , L. SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XIV Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Ciudad: Termas de Río Hondo

Año del evento: 2005

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Cristalografía

Medio de divulgación: Otros

#### **Magnetic structure determination in REBaCuMO5 perovskites (M=Fe, Co; RE = Y, La, Pr, Nd, Er, Tm, Lu) (2004)**

ÁLVARO W. MOMBRÚ , L. SUESCUN , H. PARDO , FACCIIO , R. , I. ELUÉN , F. A. RABUFFETTI , M. I.  
MAISONNEUVE , B. H. TOBY , C. JONES , A. E. GOETA , K. H. ANDERSEN

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Frontiers in Materials Research: a CIAM-CIMAT-CONICYT Workshop

Ciudad: Viña del Mar

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y  
Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

#### **Local Structure of Co and Cu in the Y1-xNdxBaCuCoO5+d series (2004)**

FACCIIO , R. , H. PARDO , L. SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Activity Report 2004 LNLS

Ciudad: Campinas, Brasil

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y  
Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

#### **Copper substitution in YBCO by Mn, Fe, Co, Ni (2003)**

F. A. RABUFFETTI , ÁLVARO W. MOMBRÚ , O. N. VENTURA , H. PARDO , L. SUESCUN , FACCIIO ,  
R.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors

Ciudad: Río de Janeiro

Año del evento: 2003

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

#### **Structure in the REBaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (2003)**

H. PARDO , L. SUESCUN , FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Activity Report 2003. Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS)

Ciudad: Campinas, Brasil

Año del evento: 2003

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

#### **Synthesis and characterization of La<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>BaCuCoO<sub>5</sub> and Y<sub>1-x</sub>Nd<sub>x</sub>BaCuCoO<sub>5+d</sub> solid solutions (2003)**

L. SUESCUN , ÁLVARO W. MOMBRÚ , FACCIO, R. , H. PARDO

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Activity Report 2003. Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS)

Ciudad: Campinas, Brasil

Año del evento: 2003

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

#### **Local structure in REBaM<sub>1</sub>M<sub>2</sub>O<sub>5+d</sub> (RE= rare earth or yttrium) (M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub> = Mn, Cu, Co) (2003)**

FACCIO, R. , ÁLVARO W. MOMBRÚ , L. SUESCUN , H. PARDO

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Activity Report 2003. Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS)

Ciudad: Campinas, Brasil

Año del evento: 2003

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis y Caracterización de nuevos materiales

Medio de divulgación: Otros

### **TEXTOS EN PERIÓDICOS O REVISTAS**

#### **Grafeno el material del futuro en el que la facultad de química invierte us 60 mil (2019)**

Revista Cromo, Diario El Observador

Periodicos

FACCIO, R. , MOMBRÚ, A W , PARDO, H.

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología Y Ciencias de Materiales

Medio de divulgación: Internet

Fecha de publicación: 02/09/2019  
Lugar de publicación: Montevideo  
<https://www.elobservador.com.uy/nota/grafeno-el-material-del-futuro-en-el-que-la-facultad-de-quimica>

#### **Cargando: el Futuro de las Baterías (2017)**

Revista Cromo, Diario El Observador  
Periodicos  
FACCIO, R.

Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Caracterización de materiales. Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Energía  
Medio de divulgación: Internet  
Fecha de publicación: 13/05/2017  
<http://www.cromo.com.uy/cargando-el-futuro-las-baterias-n1070187>

#### **Graphite magnets get ready for applications (2004)**

Physics World - the member magazine of the Institute of Physics  
Periodicos  
B. DUMÉ, ÁLVARO W. MOMBRÚ, H. PARDO, FACCIO, R., F. M. ARAÚJO MOREIRA

Palabras clave: Nanotechnology Magnetic Carbon  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanomateriales  
Medio de divulgación: Internet  
Fecha de publicación: 26/07/2004  
<http://physicsworld.com/cws/article/news/2004/jul/26/graphite-magnets-get-ready-for-applications>

## **Producción técnica**

### **PRODUCTOS**

#### **Hisopos de Cabezal de Silicona. transferencia tecnológica Udelar/Gomsil Ltda. Para kits de muestreo Covid-19 (2020)**

, Instrumento  
FACCIO, R.

País: Uruguay  
Disponibilidad: Restricta  
Producto con aplicación productiva o social: Registrado ante MSP para la producción local de hisopos. Transferencia a la empresa Gomsil desde Udelar  
Institución financiadora: Kits-Covid: Integrante de grupo interdisciplinar entre FQ, FING, FADU y ECDU-UdelaR, diseño y evaluación de hisopos para toma de muestras virales. Prototipo en evaluación para habilitación por parte MSP, a través de convenio FQ-MSP 2020. Transferencias Te  
Palabras clave: covid-19 hisopos silicona  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Polímeros  
Medio de divulgación: Otros

#### **MATERIAL FILTRANTE Y FILTRO PARA RETENER HIDROCARBUROS POLIAROMÁTICOS, CARBONILOS Y OTROS COMPUESTOS (2020)**

, Fármacos y similares  
Tomás Bense Candela, Magela María Banchemo Isasmendi, Eleuterio Francisco Umpiérrez Vázquez, Cristina Rufener, Juan Pablo Villanueva Stark, Helena Pardo Mineti, FACCIO, R., Alvaro Washington Mombrú Rodríguez  
Solicitud de Registro de Patente. Fecha de Solicitud 10/09/2019. International Application Number: PCT/IB2020/051801 (México), PI 38364 (Uruguay).  
País: Uruguay  
Disponibilidad: Restricta

Institución financiadora: MontePaz/UdelaR

Patente o Registro:

Patente de invención

PCT/IB2020/051801, MATERIAL FILTRANTE Y FILTRO PARA RETENER HIDROCARBUROS POLIAROMÁTICOS, CARBONILOS Y OTROS COMPUESTOS

Depósito: 10/09/2019; Examen: ; Concesión:

Patente nacional: NO

Palabras clave: grafeno filtro

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Nanomateriales

Medio de divulgación: Papel

## PROCESOS

### **Desarrollo del proceso de producción artículos caucho, a partir de aglomerados de polvo de neumáticos reciclados (2003)**

Proceso Productivo

FACCIO, R., R. LEOENE, A. BOLOGNA

Desarrollo realizado en el marco de

País: Uruguay

Disponibilidad: Restringida

Proceso con aplicación productiva o social: Producto actualmente comercializado por CoCaucho S.A.

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Polímeros

Medio de divulgación: Papel

Proyecto realizado en el marco de la asignatura "pasantía" de la carrera Ingeniería Química. Este producto se encuentra actualmente en producción por la empresa COCAUCHO S.A.

## OTRAS PRODUCCIONES

### ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

#### **VI Encuentro Nacional de Química: ENAQUI6 (2019)**

FACCIO, R.

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay, Torre de las Telecomunicaciones de ANTEL, Montevideo

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Web: [enaqui.fq.edu.uy](http://enaqui.fq.edu.uy)

Duración: 1 semana

Institución Promotora/Financiadora: PEDECIBA

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

#### **VIII Reunión Nacional de Sólidos (Argentina) & Primer Encuentro Bi-Nacional de Sólido (2019)**

FACCIO, R., S FAVRE

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay, Edificio Polifuncional "José Luis Massera" de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República Montevideo

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Web: <https://sites.google.com/view/solidos-2019/>

Duración: 1 semana

Evento itinerante: SI

Institución Promotora/Financiadora: UdelaR-PEDECIBA

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Ciencias Físicas /

#### **V Workshop on novel methods for electronic structure calculations (2015)**

FACCIO, R.  
Congreso  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay, Facultad de Química. Universidad de la República Montevideo  
Idioma: Inglés  
Medio divulgación: Internet  
Web: <http://cryssmat.fq.edu.uy/VWNMESC/index.htm>  
Duración: 1 semanas  
Evento itinerante: SI  
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química. Universidad de la República  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

## Evaluaciones

### EVALUACIÓN DE PROYECTOS

#### COMITÉ EVALUACIÓN DE PROYECTOS

##### **Integrante del Comité Técnico de Área, Fondo Clemente Estable 2020 (FCE-ANII), Ingenierías y Tecnologías (2020)**

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20

Fondo Clemente Estable 2020 (FCE-ANII),

##### **Sub Comisión de Proyectos CISC I+D Tecnológicos (2018 / 2020)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Área Física, DETEMA, Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
Universidad de la República  
Integrante del SubComité de Evaluación

##### **SubComisión de Evaluación de Proyectos I+D de las "Primeras Jornadas entre la Intendencia de Montevideo y la Facultad de Ingeniería-UdelaR" (2017)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Área Física, DETEMA, Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
Universidad de la República  
Integrante de la SubComisión de Evaluación de Proyectos

##### **Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC) de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación Argentina (2012)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / MINCYT / Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC) de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, Argentina  
Cantidad: Menos de 5  
Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC) de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación Argentina  
Desarrollo de nanoproduitos en sistemas Roca - Fluido. Fondo Sectorial de NANOTECNOLOGIA. FONARSEC. Montos de U\$S 10.000.000 Evaluador Extranjero

##### **Comisión Sectorial de Enseñanza - GAIE (2008 / 2015)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
Cantidad: Mas de 20  
Comisión Sectorial de Enseñanza - GAIE  
Representante de FQ al "Programa de Apoyo a la Realización de Proyectos de Investigación para Estudiantes Universitarios". Miembro del Grupo de Apoyo a la Investigación Estudiantil - GAIE.  
Miembro del Comité Evaluador desde el año 2008

### EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

**"Proyectos de Investigación Básica 2020", Fondo Nacional de Desarrollo Científico Tecnológico y de Innovación Tecnológica, FONDECYT - CONCYTEC ( 2020 )**

Perú

Fondo Nacional de Desarrollo Científico Tecnológico y de Innovación Tecnológica, FONDECYT - CONCYTEC

Cantidad: De 5 a 20

**Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, EVALUACIÓN DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN ( 2020 )**

Colombia

Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia

Cantidad: Menos de 5

**"Proyectos de Investigación Básica 2019-01", Fondo Nacional de Desarrollo Científico Tecnológico y de Innovación Tecnológica, FONDECYT - CONCYTEC ( 2019 )**

Perú

Fondo Nacional de Desarrollo Científico Tecnológico y de Innovación Tecnológica? FONDECYT - CONCYTEC

Cantidad: Mas de 20

**"Incorporación de Investigadores", Fondo Nacional de Desarrollo Científico Tecnológico y de Innovación Tecnológica, FONDECYT - CONCYTEC ( 2019 )**

Perú

BID, Fondo Nacional de Desarrollo Científico Tecnológico y de Innovación Tecnológica, FONDECYT - CONCYTEC

Cantidad: De 5 a 20

**Concurso de Ingresos a la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico, CONICET ( 2019 )**

Argentina

CONICET

Cantidad: Menos de 5

**proyectos de Investigación Científica y Tecnológica para la adjudicación de subsidios a grupos de investigadores formados y activos de la UNJu. PICTO-UNJU, ANPCyT/FONCYT ( 2019 )**

Argentina

UNJu, ANPCyT, FONCYT

Cantidad: Menos de 5

**"INVESTIGACIÓN APLICADA", PROGRAMA PARAGUAYO DE APOYO AL DESARROLLO DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA, CONACYT ( 2018 )**

Paraguay

CONACYT

Cantidad: Menos de 5

**ANII- Capacitación de personal para operación y/o mantenimiento de grandes equipos científicos ( 2017 )**

Uruguay

ANII - VINCULACIÓN CON CIENTÍFICOS Y TECNÓLOGOS DEL EXTERIOR

Cantidad: Menos de 5

**ANII - Becas de Posdoctorado Fondo "Profesor Dr. Roberto Caldeyro Barcia" ( 2017 )**

Uruguay

ANII

Cantidad: Menos de 5

**Proyectos Fondo Carlos Vaz Ferreira (FVF), D2C2, MEC ( 2017 )**

Uruguay

Dirección de Innovación Ciencia y Tecnología para el Desarrollo, D2C2, MEC

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Proyectos

**National Fund for Scientific and Technological Development (FONDECYT)?, Regular 2017 FONDECYT (2017 )**

Chile  
FONDECYT- CONICYT  
Cantidad: De 5 a 20  
Evaluador de proyectos

**Organización de Eventos CTI - 2016 - I (2016 )**

Perú  
Cantidad: Menos de 5

**Beca de Movilidad Capacitación - 2016 - ANII (2016 )**

Uruguay  
Cantidad: Menos de 5

**Proyectos Comisión Sectorial de Investigación Científica - I+D (2016 )**

Uruguay  
CSIC UdelaR  
Cantidad: Menos de 5

**ANII - VINCULACIÓN CON CIENTÍFICOS Y TECNÓLOGOS DEL EXTERIOR (2015 )**

Uruguay  
ANII - VINCULACIÓN CON CIENTÍFICOS Y TECNÓLOGOS DEL EXTERIOR  
Cantidad: De 5 a 20  
ANII - VINCULACIÓN CON CIENTÍFICOS Y TECNÓLOGOS DEL EXTERIOR

**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA (PICT) - ANPCyT/FONCyT (2015 )**

Argentina  
Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT). Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCyT)  
Cantidad: De 5 a 20  
Evaluación desde el año 2015, hasta la fecha.

**Investigación de Ciencias Básicas y Aplicadas (2015 )**

Perú  
Fondo Nacional de Desarrollo Científico, Tecnológico y de Innovación Tecnológica- Secretaria Nacional de Educación Superior, Ciencia y Tecnología  
Cantidad: Menos de 5

**Comisión Sectorial de Investigación Científica - Iniciación a la Investigación -CSIC (2013 )**

Uruguay  
Comisión Sectorial de Investigación Científica - Iniciación a la Investigación -CSIC  
Cantidad: De 5 a 20  
Evaluador de proyectos

**Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC) de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación Argentina (2012 )**

Argentina  
Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC) de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación Argentina  
Cantidad: Menos de 5  
Desarrollo de nanoproduitos en sistemas Roca - Fluido. Fondo Sectorial de NANOTECNOLOGIA. FONARSEC. Montos de U\$S 10.000.000 Evaluador Extranjero

**Secretaria Nacional de Educación Superior, Ciencia, Tecnología e Innovación (2011 )**

Ecuador  
Secretaria Nacional de Educación Superior, Ciencia, Tecnología e Innovación  
Cantidad: Menos de 5  
Evaluador de Proyectos SENESCYT 2010

**Comisión Sectorial de Investigación Científica (2010 )**

Uruguay

Comisión Sectorial de Investigación Científica  
Cantidad: Menos de 5

#### **Comisión Sectorial de Enseñanza - GAIE (2008 / 2015)**

Uruguay

Comisión Sectorial de Enseñanza - GAIE

Cantidad: Mas de 20

Representante de FQ al "Programa de Apoyo a la Realización de Proyectos de Investigación para Estudiantes Universitarios". Miembro del Grupo de Apoyo a la Investigación Estudiantil - GAIE.  
Miembro del Comité Evaluador desde el año 2008

### **EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES**

#### **COMITÉ EDITORIAL**

#### **Polymers, special Issue: "State-of-the-Art Polymer Science and Technology in Uruguay (2021,2022)" (2021)**

Tipo de publicación: Revista

Editorial: MDPI

Cantidad: Menos de 5

Special Issue "State-of-the-Art Polymer Science and Technology in Uruguay (2021,2022)" The beginning of polymer science in Uruguay is relatively recent and the most significant works has been reported just after the late eighties, covering the study of synthesis and structural characterization of organic and coordination polymers (FQ-UdelaR), polymers from natural sources (FCIEN&FQ-UdelaR), polymers with immunological (FQ-UdelaR), electromechanical (FCIEN-UdelaR), optical (FING-UdelaR) and antifouling properties (FING-UdelaR). During the last ten years, Uruguayan institutions fundamental and applied research conducted in the field of polymer science is led by the Physics Group at FQ-UdelaR, particularly focusing in the experimental and theoretical study of polymer's structure and its correlations with electrical transport for energy conversion and storage applications. In addition, other research is focused in the extraction and characterization of biopolymers mainly for food (CENUR-UdelaR), and others with antimicrobial (FQ-UdelaR), pharmaceutical (FQ-UdelaR), cosmetic (FQ-UdelaR), biocatalysts membranes (FING-ORT), textile and wood industry (FING-UM and FING-UdelaR) and constructing applications (FADU-UdelaR). Finally, other research is focused on mechanical properties of polymer fluids (FCIEN-UdelaR) and environmental studies of microplastics (CENUR-UdelaR). The research on polymer technology including engineering and processing is carried out by FING&CENUR-UdelaR, and in WPC and rubber with natural nano silica (FING&FCIEN-UdelaR). Finally, CTplas is working on issues of circular economy and plastic recycling. References for institutions are: UdelaR (Universidad de la República), UM (Universidad de Montevideo), ORT (Universidad ORT), FQ (Facultad de Química), FCIEN (Facultad de Ciencias), FING (Facultad de Ingeniería), FADU (Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo), CENUR (Centro Universitario Regional Litoral Norte, Noreste & Este) and CTplas (Centro Tecnológico del plástico). In this Special Issue, we aim to present a broad overview on recent developments in the field of polymer science and technology in Uruguay. Reviews, original articles, and state-of-the-art research papers, covering all the aspects of current trends in polymer-based materials research performed in Uruguay or by Uruguayan researchers working abroad are welcome. The topics of this special issue will include, but are not limited to: Polymers chemistry and physics Polymersmicro- and nano-composites Biopolymers and bio-based polymers Polymers processing and engineering Polymers sustainability Prof. Dr. Ricardo Faccio Prof. Dr. Mariano Romero Prof. Dr. Fernando Ferreira Prof. Pablo Raimonda, Chem. Eng. Prof. Dr. Álvaro W. Mombrú Guest Editors

#### **Frontiers Research Topic" The Physical Chemistry of Organic-Inorganic Interfaces as a Key to Understanding Hybrid Nanomaterials" (2021)**

Tipo de publicación: Revista

Editorial: www.frontiersin.org

Cantidad: Menos de 5

About this Research Topic There have been many advances in the preparation and characterization of nanomaterials with hybrid organic-inorganic interfaces, triggered by the pursuit of improvement of different materials' performance. It is widely accepted that many magnetic, ionic, electronic, and optoelectronic properties can be drastically enhanced for hybrid organic-inorganic nanomaterials such as polymer nanocomposites with 0D, 1D, 2D, and 3D inorganic (including carbon) nanostructures compared to their isolated counterparts. In addition, there have been numerous advances in the study of small organic molecule's adsorption onto inorganic surfaces that have shed some light on the physical chemistry of these interfaces - mainly for chemical sensing and

catalysis, but also for electronics-related applications. However, there is still an outstanding need to understand the mechanisms involved in the physical chemistry processes at these complex organic-inorganic interfaces. This Research Topic aims to become the point of reference for experimental and theoretical research on the physical chemistry of organic-inorganic interfaces for advancing the understanding of different hybrid nanomaterials in a broad range of applications. Experimentally, we would like to cover all aspects of the use of novel methods for the preparation of well-defined hybrid organic-inorganic interfaces, and advances in their characterization using modern and more specific instrumentation techniques. Theoretically, we aim to address state-of-the-art updates on existing computational approaches for hybrid organic-inorganic interface modeling, covering ab-initio, classical, and hybrid methodologies. We welcome Original Research, Review, Mini Review and Perspective articles on themes including, but not limited to: ? Novel molecule, oligomer or polymer interaction with 0D, 1D, 2D and 3D inorganic (including carbon) nanostructures. ? Electronic, ionic, and magnetic transport in organic-inorganic interfaces. ? Advances in preparation, characterization, and simulation techniques for organic-inorganic interfaces. ? Investigation of electrochemical, optical, and sensing properties

## **REVISIONES**

### **ACS Catalysis ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Applied Nanoscience ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Materials Advances ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Tetrahedron ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Journal of Cluster Science ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Membranes ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology ( 2022 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Journal of Nanoparticle Research ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Spectrochimica Acta Part A ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Electrophoresis ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

### **Computational Condensed Matter ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**International Journal of Energy Research ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Optical Materials ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**ACS Applied Energy Materials ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Polymers ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Green Technology, Resilience, and Sustainability ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Energy Technology ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Journal of Colloid and Interface Science ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Materials Science in Semiconductor Processing ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Journal of the Science of Food and Agriculture ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**ChemPhysChem ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Materials Science for Energy Technologies ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**ChemistrySelect ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**FlatChem ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Materials Today Energy ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

**Journal of Molecular Structure ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Measurement ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Soft Computing ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Electrochimica Acta ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Non-Crystalline Solids ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Solar Energy ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**ChemCatChem ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Adsorption ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Applied Physics A ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Ceramics International ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Computational and Theoretical Chemistry ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Condensed Matter ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Functional Materials Letters (FML) ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Inorganic Chemistry ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20

**Journal Of Electrochemical Soceity ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Nanostructure in Chemistry ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Physics & Chemistry of Solids ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Raman Spectroscopy ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal Of Rare Earths ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Materials Today Communications ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Physica B ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Topics in Catalysis ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Oriental Journal of Chemistry ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**ChemCatChem ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Crystal Growth ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Nano Biomedicine and Engineering ( 2019 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Solid State Chemistry ( 2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**ACS Omega ( 2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Inorganic Chemistry (2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Medicinal Chemistry (2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Science, Education and Technology (2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Electronic Structure (2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Contaminant Hydrology (2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Current Nanoscience (2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20

**Synthetic Metals (2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**IOP eBooks (2017 )**

Tipo de publicación: Libros  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Self-Assembly and Molecular Electronics (2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Superlattices and Microstructures (2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Revista Ingeniería y Competitividad (2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**AIP Advances (2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Polymer Composites (2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Power Sources (2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Mas de 20

**Colloids and Surfaces B: Biointerfaces (2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Acta Physica Polonica ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Applied Radiation & Isotopes ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Renewable energy and substantial development ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**BAOJ Physics ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Catalysis Letters ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Revista CIDET ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Colloids and Surfaces B ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**International Journal of Solids and Structures ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Molecular Modeling ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Materials Chemistry and Physics ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Open Physics ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Nature: Scientific Reports ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Microchemical Journal ( 2016 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Computational Materials Science ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Alloys and Compounds ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Thin Solid Films ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**2D Materials ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**CIDET ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Applied Surface Science ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Mas de 20

**Journal of Self-Assembly and Molecular Electronics ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**International Journal of Materials Science and Applications (IJMSA) ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5  
Referee de Journal

**Nanoscale ( 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Inorganic Materials ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Semiconductor Science and Technology ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Materials Research Express ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20  
Referee de Journal

**Journal of Vacuum Science & Technology ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5  
Reviewer de Journal

**International Journal of Modern Physics B ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**INNOTECH ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Carbon ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**RSC Advances (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20  
Referee de Journal

**International Journal of Energy and Power Engineering (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Applied Physics (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20  
Journal Reviewer

**Procedia Materials Science (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5  
Procedia Materials Science: International Congress of Science and Technology of Metallurgy and Materials, SAM - CONAMET 2013

**European Physical Journal B (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**International Journal of Hydrogen Energy (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20

**The European Physical Journal B (2013)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Applied Physics Letters (2012)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20  
Referee

**NANO (2012)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Materials Chemistry (2012)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20  
Referee

**Surface Science (2012)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5  
Referee de Journal

**The Journal of Chemical Physics (2012)**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5  
Referee de journal

**Physical Chemistry Chemical Physics (2011)**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Mas de 20

**Chemical Physics Letters ( 2011 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referee de Journal

**Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry ( 2011 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referee de Journal

**Nanotechnology, Science and Applications ( 2011 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referee

**J. Phys. D: Appl. Phys. ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: De 5 a 20

Referee de J. Phys. D: Appl. Phys.

**Physica Scripta ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referee de journal

**Nanotechnology ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Mas de 20

Referee de journal

**Avances en Ciencias e Ingeniería ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referee

**The Journal of Physical Chemistry ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Mas de 20

Reviewer de journal

**Intermetallics ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer de journal

**J. Phys.: Condens. Matter ( 2009 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Mas de 20

Referee de Journal

**Central European Journal of Physics ( 2009 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: De 5 a 20

Reviewer de Journal

**New Journal of Physics ( 2009 )**

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referee de journal

**Anales de la Asociación de Física Argentina (AFA) ( 2020 )**

Revisiones  
Argentina

AFA

**Third International Conference on Physics, Mathematics and Statistics (ICPMS2020) ( 2020 )**

Revisiones  
China

IOP Journal of Physics: Conference Series

**VI Encuentro Nacional de Química. ENAQUI6 ( 2019 )**

Comité programa congreso  
Uruguay  
Arbitrado

ANII, Facultad de Química, Udelar

**VIII Reunión Nacional de Sólidos (Argentina) & Primer encuentro Bi-Nacional de Sólidos (Uruguay-Argentina) ( 2019 )**

Comité programa congreso  
Uruguay  
Arbitrado

Udelar, PEDECIBA

**The 9th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices. LDSD 2019 ( 2019 )**

Comité programa congreso  
Chile  
Arbitrado

FONDECYT,

**The 3rd International Conference on New Material and Chemical Industry ( 2018 )**

Revisiones  
China

**III Congreso Argentino de Energías Sustentables, III-CES ( 2018 )**

Revisiones

Universidad del Comahue

**XXIII Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES). (Proceedings) ( 2018 )**

Revisiones  
Argentina

SLAFES  
Materials Today: Proceedings

**Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM ( 2017 )**

Revisiones  
Paraguay

Universidad Nacional de Itapúa  
Evaluación de Resúmenes para el ND CIENCIA E INGENIERÍA DE LOS MATERIALES

**II Congreso de Energías Sustentables -II CES- ( 2016 )**

Revisiones  
Argentina

Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Bahía Blanca.

**42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression - QUITEL (2016)**

Comité programa congreso  
Uruguay  
Arbitrado

Miembro de Comité Organizador. Evaluador de Trabajos.

**XIX Congreso Argentino de Catálisis VIII Congreso de Catálisis del Mercosur (2015)**

Revisiones  
Argentina

Arbitro de trabajos presentados como poster y charlas orales

**Primer Taller Latinoamericano de Materiales de Carbono para Medio Ambiente y Energía (2014 / 2014)**

Comité programa congreso  
Uruguay

Integrante del Comité Científico

**13er Congreso Internacional en Ciencia y Tecnología de Metalurgia y Materiales (2013)**

Revisiones  
Argentina

Integrante del Comité Evaluador y Referee de trabajos a congreso

**EVALUACIÓN DE PREMIOS**

**Premio a Mejor Tesis de Maestría en Química del PEDECIBA (2018)**

Comité de asignación de premios y concursos  
Uruguay

Cantidad: De 5 a 20  
PEDECIBA

**Mi Tesis en 3 Minutos (2017)**

Comité de asignación de premios y concursos  
Uruguay

Cantidad: De 5 a 20  
PEDECIBA, Facultad de Química

**EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES**

**Programa de Equipamiento Científico, Actualización o mejora de grandes equipos científicos (PEC\_3) (2019)**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII

**ANII-Posgrados Nacionales (2018)**

Evaluación independiente

Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII  
Evaluador de Becas de Posgrado Nacionales ANII

**Llamado a Pasantías - PEDECIBA Química ( 2007 )**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
PEDECIBA-Química  
Miembro de comite evaluador de pasantías desde el año 2007

**JURADO DE TESIS**

**Maestría en Ingeniería de Celulosa y Papel ( 2021 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría

**Doctorado en Física - PEDECIBA ( 2021 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Instituto de Física , Uruguay  
Nivel de formación: Doctorado  
PEDECIBA

**Doctorado en Física ( 2020 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur / Departamento de Física , Argentina  
Nivel de formación: Doctorado

**Doctorado en Ingeniería Química ( 2019 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Instituto de Ingeniería Química , Uruguay  
Nivel de formación: Doctorado

**Maestría en Ingeniería Química ( 2019 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Instituto de Ingeniería Química , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría

**Maestría en Química ( 2019 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / PEDECIBA , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría

**Maestría en Ingeniería de la Energía ( 2018 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría

**Doctor en Ciencia y Tecnología - Mención Física ( 2015 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de General San Martín , Argentina  
Nivel de formación: Doctorado

**Doctorado en Química ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

#### **Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas - Física ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de La Plata , Argentina

#### **Doctorado en Ciencia y Tecnología de los Alimentos ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina

#### **Practicantado de carreras de Grado de Facultad de Química ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Nivel de formación: Grado

Evaluador de Trabajo de Practicando en Química Farmacéutica

#### **Maestría en Física (UDELAR-PEDECIBA) ( 2013 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

#### **Tesina de Licenciatura en Bioquímica ( 2013 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

Nivel de formación: Grado

#### **Doctorado en Química ( 2011 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina

#### **PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS PGMAT ( 2010 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Santa Catarina , Brasil

Nivel de formación: Doctorado

#### **Posgrado en Química - Pasaje a Doctorado ( 2010 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

## **Formación de RRHH**

### **TUTORÍAS CONCLUIDAS**

#### **POSGRADO**

#### **Biosíntesis de nanopartículas de plata: caracterización y estudio de su potencial antimicrobiano (2016 - 2024)**

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. , ALBORÉS, S. )

Nombre del orientado: María Belén Estevez

País: Uruguay

Palabras Clave: nanopartículas plata antimicrobiano

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Pasaje a Doctorado, Marzo/2019

#### **Preparación, Caracterización y Modelado de Nanomateriales para almacenamiento de Energía (2019 - 2023)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias /  
Doctorado en Física, PEDECIBA, Uruguay  
Programa: Doctorado en Física (UDELAR-PEDECIBA)  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. , S FAVRE )  
Nombre del orientado: Lucía Amy  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Na-ion titanates batteries DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de  
Materiales y Nanotecnología

#### **Estudios DFT y caracterización de Nanoestructuras de Titanatos para baterías de ion-litio (2018 - 2023)**

Tesis de doctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina  
Programa: Doctor en Física  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. , Estela Gonzalez , Pablo Bechthold )  
Nombre del orientado: Julián Juan  
País: Argentina  
Palabras Clave: DFT Titanatos ion-litio  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Director de Beca de Tesis CONICET

#### **Preparación, caracterización y modelado de nanocompuestos poliméricos para sistemas de almacenamiento de energía (2016 - 2023)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Fernando Pignanelli  
País: Uruguay  
Palabras Clave: nanopolímeros li ion battery  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Pasaje a Doctorado en 2018

#### **Preparación, Simulación y Caracterización de Materiales Nanoestructurados para Electroodos de Celdas de Combustible de Óxido Sólido de Temperatura Intermedia (IT-SOFC) (2013 - 2023)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. )  
Nombre del orientado: Santiago Vázquez Cuadriello  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Nanotechnology SOFC  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Nanotecnología y Nanomateriales

#### **Nuevos Nanocompuestos como capa activa de celdas solares poliméricas: preparación, caracterización y evaluación de desempeño (2017 - 2022)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Dominique Momburú  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Polímeros Celdas Solares capa activa  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

**Tecnología farmacéutica innovadora aplicada al desarrollo de nuevos antihelmínticos (2015 - 2022)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. )  
Nombre del orientado: Elisa Melian  
País: Uruguay  
Palabras Clave: antihelmínticos formulación Microscopia Raman Difracción de Rayos X  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Farmacología y Química Médica  
Posgrado financiado por ANII POS\_NAC\_2015\_1\_110021. Pasaje de Posgrado a Doctorado el 23/2/2018. Pasaje de Posgrado a Doctorado el 23/02/2018. Defensa de Tesis de Doctorado el 6/9/2022

**Diseño y Preparación de Nanomateriales Carbonosos Para Espintrónica (POS\_2011\_1\_3317) (2011 - 2022)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Lic. Sebastián Píriz  
País: Uruguay  
Palabras Clave: DFT Nanotecnología espintrónica grafeno  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología, DFT  
Inscrito a Posgrado de Facultad de Química, financiado por Becas de Posgrado Nacionales 2012 ( POS\_2011\_1\_3317) Defensa de Pasaje a Doctorado, 3/10/2014. Beca CAP-CSIC.

**Optimización de Propiedades de Materiales Avanzados (POS\_2011\_1\_3686)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad  
Nombre del orientado: Qco. Mariano Romero  
País: Uruguay  
Palabras Clave: materiales nanotecnología DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología, DFT  
Inscrito a Posgrado de Facultad de Química, financiada como Beca de Posgrado Nacional 2012 (POS\_2011\_1\_3686) y Beca Doctorado 2013. Concluida el 18/02/2016

**Síntesis, caracterización estructural y modelado de nanoestructuras de dióxido de titanio y titanatos con potencial aplicación en DSSCs**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)  
Nombre del orientado: Ing. Quím. Luciana Fernández  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Nanotecnología Celdas Solares óxido de titanio nanomateriales  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación, DFT, nanomateriales, celdas solares  
Co-director de Tesis

**Estudo Experimental e de Primeiros Princípios das Propriedades Físicas de carbono grafite magnético**

Tesis de doctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidade Federal de São Carlos , Brasil

Programa: Posgraduación en Física  
Nombre del orientado: Rodrigo Yoshikawa Oeiras  
País: Brasil  
Palabras Clave: graphene  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estudios por primeros principios de Estructura Electrónica

## **GRADO**

### **Nanoestructuras de titanatos de litio para uso en Celdas Solares de Sensibilización Espectral**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad  
Nombre del orientado: Martín Esteves  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Celdas Solares DSSC litio  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

### **Preparación y Caracterización de Celdas Solares de base Perovskita**

Docente adscriptor/Practicantado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Área Física. DETEMA , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Pablo Garay  
País: Uruguay  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología

### **Preparación, caracterización y simulación de nanocompuestos polianilina-grafeno**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Dominique Mombrú  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Polímeros grafeno nanocompuestos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

### **Nuevos materiales como sistemas para absorción de energía en el infrarrojo**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Ingeniería Química  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Benjamín Montenegro  
País: Uruguay  
Palabras Clave: DFT energía solar Propiedades ópticas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

### **Practicantado de la carrera Química Farmacéutica: ENCAPSULAMIENTO DE PROPÓLEOS CON ETILCELULOSA, Y CARACTERIZACIÓN DE TÉCNICAS ANALÍTICAS PARA SU CUANTIFICACIÓN**

Docente adscriptor/Practicantado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Asesor  
Nombre del orientado: Pablo Miranda

País: Uruguay  
Palabras Clave: encapsulación propóleos  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

#### **Nanoestructuras de óxido de Titanio para uso en Celdas Solares de Sensibilización Espectral.**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Fernando Pignanelli  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Nanotecnología Celdas Solares óxido de titanio nanomateriales y nanotecnología Energías Renovables  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

#### **Pasantía Final de Carrera, Ingeniería Química**

Docente adscriptor/Practicantado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería , Uruguay  
Nombre del orientado: Melisa Olivera  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Polímeros polímeros de impresión  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / polímeros  
Docente Tutor por Facultad de Química

#### **Micropartículas de propóleos secadas por spray**

Docente adscriptor/Practicantado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Nombre del orientado: Selva Cora  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Micropartículas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología  
Practicantado de la Facultad de Química Plan de Estudios 2000r spray

#### **Pasantía Final de Carrera, Ingeniería Química**

Docente adscriptor/Practicantado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería , Uruguay  
Nombre del orientado: Alejandra Szabo  
País: Uruguay  
Palabras Clave: colágena, extracción y producción  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / extracción  
Docente tutor, facultad de Química

#### **Practicantado de final de carrera de Químico, opción Materiales**

Docente adscriptor/Practicantado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Nombre del orientado: Mariano Romero  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Materiales  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Materiales-Superconductividad

#### **Desarrollo de un proceso para la deposición de hidroxiapatitas sobre superficies de implantes óseos**

Docente adscriptor/Practicantado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Nombre del orientado: Cecilia Goyenola  
País: Uruguay  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Biomateriales  
Pasantía final de carrera para Título de Ing. Químico. Tutor principal FQ: Dr. Álvaro Mombrú  
Asesor parte experimental FQ: Dr. Ricardo Faccio

#### **Síntesis y estudio estructural de la serie $Y_{1-x}Nd_xBaCuCoO_{5+\delta}$ (Supervisión de trabajo Experimental)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Nombre del orientado: BSc. Sebastián Piriz  
País: Uruguay  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Caracterización Estructural  
Tutor: Prof. Dr. Álvaro W. Mombrú Supervisor del trabajo experimental: Dr. Ricardo Faccio

#### **OTRAS**

#### **Diseño MEDIANTE DFT de nanomateriales APTOS PARA SENSORES DE COMPUESTOS VOLÁTILES AZUFRADOS (2018 - 2022)**

Orientación de posdoctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina  
Programa: Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. , Ignacio López Corral )  
Nombre del orientado: Alejandro González Fa  
País: Argentina  
Palabras Clave: DFT Sensores  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **Preparación de Filtros basados en Grafeno para tratamiento de agua (2019 - 2021)**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Instituto de Ingeniería Química/ Instituto Polo Tecnológico de Pando , Uruguay  
Programa: Grado en Ingeniería Química  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( FACCIO, R. , PARDO, H. )  
Nombre del orientado: Juan Pablo Villanueva Stark  
País: Uruguay  
Palabras Clave: grafeno óxido de grafeno tratamiento de agua  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Nanotecnología / Nano-materiales / Grafeno

#### **Estudio de propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de ferritas mediante métodos de primeros principios: volumen, superficies, interfaces y el rol de los defectos**

Orientación de posdoctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de La Plata , Argentina  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad  
Nombre del orientado: Karen Salcedo  
País: Argentina  
Palabras Clave: DFT ferritas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **Celdas solares basadas en nanotecnología: nuevas tintas y superficie modelo**

Orientación de posdoctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Dra. Estefanía Germán  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Simulación Computacional Celdas Solares nanomateriales y nanotecnología  
Electronic Structure  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales  
Postdoctorado ANII Aprobado: PD\_NAC\_2015\_1\_108133 Llamado 2015

#### **Estudio de Propiedades Estructurales, Electrónicas e Hiperfinas de Óxidos Semiconductores Magnéticos Diluidos**

Orientación de posdoctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Dr. Diego Richard  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Estructura Electrónica DFT propiedades hiperfinas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **Simulación Computacional y Caracterización Estructural de Nanopartículas de Plata Obtenidas por Métodos Verdes**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Alejandro González Fá  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Simulación Computacional Electronic Structure nanomateriales y nanotecnología  
Microscopia Raman  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales  
Tutoría dentro del Programa ESCALA de Estudiantes de Posgrado. Asociación de Universidades  
Grupo Montevideo (AUGM)

#### **Cálculos de Estructura Electrónica en Cu<sub>2</sub>O**

Orientación de posdoctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Dra. Silvia Pelegrini  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Simulación Computacional Electronic Structure nanomateriales y nanotecnología  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales  
Estadía Postdoctoral en el marco de Proyecto CAPES-UDELAR

#### **Desarrollo de polímeros moldeados molecularmente (INI\_X\_2012\_1\_4198)**

Iniciación a la investigación  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Nombre del orientado: Melisa Olivera  
País: Uruguay  
Palabras Clave: polímeros de impresión impresión molecular  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / polímeros  
INI\_X\_2012\_1\_4198

#### **Estadía de Formación Doctoral: Cálculos Ab Initio de Defectos Puntuales en Sistemas Bi<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Milton Tumelero  
País: Uruguay  
Palabras Clave: Simulación Computacional Electronic Structure nanomateriales y nanotecnología  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales  
Estadía de Formación Doctoral: Cálculos Ab Initio de Defectos Puntuales en Sistemas Bi<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>.  
Programa CAPES-UDELAR

#### **Nuevos Nanomateriales como Sistemas para absorción de energía en el infrarojo (INI\_X\_2011\_1\_4004)**

Iniciación a la investigación  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
Nombre del orientado: Benjamín Montenegro  
País: Uruguay  
Palabras Clave: DFT SOLAR CELLS infrared  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología, electronic structure  
INI\_X\_2011\_1\_4004

#### **Tutor de pasantía: simulación computacional de propiedades fisicoquímicas de materiales semiconductores II-VI con importantes aplicaciones tecnológicas**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Tecnológica Nacional, Uruguay  
Programa: Elaboración de Materiales didácticos para Educación a Distancia  
Nombre del orientado: Ing. Ana María Martínez Naggy  
País: Uruguay  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación, DFT, celdas solares  
Estancia de investigación de la pasante en nuestro laboratorio. 40 horas

#### **Difracción de Rayos X de Polvo**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
Programa: Cristalografía  
Nombre del orientado: Qco. Paula Morales  
País: Uruguay  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Estructural  
Pasantía de Posgrado Supervisión de Trabajo Experimental: Dr. Ricardo Faccio Tutor: Dr. Álvaro W. Mombrú

#### **Física del Estado Sólido**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química (UDELAR- ANEP) - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Química  
Nombre del orientado: Prof. José Luis Di Laccio  
País: Uruguay  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Física del Estado Sólido  
Curso de Posgrado de la Maestría en Química orientación en Educación. Título de Tesis: "Desarrollo de una metodología de enseñanza en Física Moderna en la educación secundaria y sus aspectos vinculados con la Química" Tutor del Curso: Dr. Ricardo Faccio Director de Tesis: Prof. Dr. Álvaro W. Mombrú

#### **Cristalografía**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química (UDELAR-

ANEP) - UDeLaR, Uruguay

Programa: Química

Nombre del orientado: Prof. José Luis Di Laccio

País: Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cristalografía

Curso de Posgrado de la Maestría en Química orientación en Educación. Título de Tesis:

"Desarrollo de una metodología de enseñanza en Física Moderna en la educación secundaria y sus aspectos vinculados con la Química" Tutor: Dr. Ricardo Faccio Director de Tesis: Prof. Dr. Álvaro W. Momburú

#### **Estudio estructural del sistema $Y_{1-x}Nd_xBaCuCoO_{5+d}$**

Iniciación a la investigación

Sector Educación Superior/Público / Facultad de Química, Brasil

Programa: Cristalografía

Nombre del orientado: Luciana Fernández

País: Brasil

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Estructural

Tutor: Dr. Ricardo Faccio

### **TUTORÍAS EN MARCHA**

#### **POSGRADO**

#### **Determinación de la presencia de microplásticos en peces y crustáceos de interés comercial para el Uruguay (2021)**

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Veterinaria, Uruguay

Programa: Doctorado en Salud Animal

Tipo de orientación: Cotutor

Nombre del orientado: Carina Galli

País/Idioma: Uruguay,

Palabras Clave: microplásticos nanoplásticos peces

Áreas de conocimiento:

Ciencias Agrícolas / Ciencias Veterinarias / Ciencias Veterinarias

#### **Maestría profesional en Ciencia de Datos, trabajo final: "Cíclope, Sensor multiespectral AS7265x de bajo costo" (2020)**

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad Tecnológica / Instituto Tecnológico Regional Centro-Sur, Uruguay

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Tabaré Pérez

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Maestría profesional en Ciencia de Datos

#### **Diseño de nanomateriales de dióxido de titanio aptos para celdas solares de sensibilización espectral (2018)**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur, Argentina

Programa: Doctorado en Tecnología de Materiales

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Hernan Heffner

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Argentina, Español

Palabras Clave: Celdas Solares dióxido de titanio

Áreas de conocimiento:

**Modelado de Sistemas Molécula/Superficie: Aplicaciones en Nanomagnetismo y Electrónica Molecular (2016)**

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Área Física, DETEMA, Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Benjamin Montenegro

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Estructura Electrónica electronica molecular nanomagnetismo

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

Pasaje a Doctorado, 19/02/2020 Beca de posgrado aprobada: POS\_NAC\_2016\_1\_130801

## Otros datos relevantes

### PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

**Premio Leloir 2023 (2023)**

(Internacional)

Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación, Argentina.

Contribución al fortalecimiento de las capacidades científicas y tecnológicas de Argentina, aportando a la visibilización de los vínculos de cooperación internacional entre las comunidades científicas. Área Materiales y Nanotecnología.

**Mejor Presentación Oral del "I Congresso de Ciências Aplicadas à Farmácia - CONCAF, online, realizado durante os días 15 a 18 de setembro de 2020 (2020)**

(Internacional)

Universidade Estadual da Paraíba, UNESP

1er LUGAR da modalidade oral ao trabalho intitulado: "Nanocristales de Fenbendazol: Estudio de Biodisponibilidad en Onvinos" dos autores María Elisa Melian Furest, Alejandro Paredes, Santiago Palma, Ricardo Faccio, Luis Ignacio Álvarez e Laura Domínguez.

**Premio a Mejor e-Póster sub-área Físicoquímica, ENAQUI6. Nanocompósitos poliméricos con aplicación en celdas solares. Dominique Mombrú, Mariano Romero, Ricardo Faccio, Álvaro W. Mombrú (2019)**

(Nacional)

PEDECIBA

Nanocompósitos poliméricos con aplicación en celdas solares. Dominique Mombrú, Mariano Romero, Ricardo Faccio, Álvaro W. Mombrú

**Joven investigador destacado por su trayectoria académica nacional e internacional, reconocimiento del D2C2-MEC con asesoramiento de la ANCIU (2017)**

(Nacional)

Dirección para el Desarrollo de la Ciencia y el Conocimiento (D2C2-MEC)

Con asesoramiento técnico de la Academia Nacional de Ciencias del Uruguay ANCIU se otorga el Reconocimiento 2017 a quien suscribe como joven investigador destacado por su trayectoria académica nacional e internacional.

**Primer Premio a Mejor Póster de Congreso ENAQUI V. Primer Premio a Mejor Póster de Congreso, 5to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI V). Nanopartículas de plata biogénicas con actividad antibacteriana: estudio de la interacción nanopartículas-bacteria. (2017)**

(Nacional)

5to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI V)

Primer Premio a Mejor Póster de Congreso, 5to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI V).

Nanopartículas de plata biogénicas con actividad antibacteriana: estudio de la interacción nanopartículas-bacteria. Estevez, Belén, Alborés, Silvana y Faccio, Ricardo.

### **1° Premio al mejor trabajo del congreso (2016)**

(Nacional)

Red Uruguaya de Cristalografía

Premio a Mejor Trabajo del Segundo Encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía.

DOMINIQUE MOMBRÚ; FACCIO, R.; HELENA PARDO; ÁLVARO W. MOMBRÚ Estructura y propiedades físicas en la serie (La-Sr,Nd-Ce)<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>, 2016 Evento: Nacional, Segundo encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía, 2016

### **Premio Caldeyro Barcia del área Química 2013 (2013)**

(Nacional)

Programa de Desarrollo de Ciencias Básicas - PEDECIBA

Reconocimiento con el Premio por el aporte a la investigación nacional en el área Química.

### **Artículo Seleccionado para Website Lab Talk de IOP (2012)**

(Internacional)

IOP (Internacional) Institute of Physics, Publishing IOP

Artículo Seleccionado para Website Lab Talk de IOP (Internacional) Institute of Physics, Publishing IOP A raíz del artículo Magnetism in multivacancy graphene systems, IOP invitó a los autores a crear una página de noticias sobre el mismo Sistema Nacional de Investigadores en el marco de Lab Talk de IOP: <http://iopscience.iop.org/0953-8984/labtalk-article/50658>

### **Paper selected for JPCM Highlight Papers 2009 as a one of the best articles published during 2009 (2010)**

(Internacional)

Editorial IOP. JPCM

Paper selected for JPCM Highlight Papers 2009 as a one of the best articles published during 2009.

<http://iopscience.iop.org/0953-8984/page/Highlights%20of%202009>

### **Nivel I del SNI (2009)**

(Nacional)

ANII

### **2° premio al mejor trabajo del congreso (2007)**

III ENCUENTRO LATINOAMERICANO DE BANCOS DE TEJIDOS

### **1° Premio al mejor trabajo del congreso (2006)**

V Congreso Iberoamericano de Sensores

### **Beca School on Synchrotron Radiation and Applications In Memory of J.C. Fuggle and L. Fonda (2006)**

The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics - ICTP

### **BECA "Argonne National Laboratory, Advanced Photon Source (APS) e Intense Pulsed Neutron Source (IPNS), Chicago-USA" (2006)**

CSIC UdelaR

### **1° Premio al mejor trabajo del congreso (2005)**

4th World Congress on Tissue Banking

### **Beca de Doctorado (2005)**

PEDECIBA-Química

## **PRESENTACIONES EN EVENTOS**

### **Congresso de Ciências Aplicadas à Farmácia (2020)**

Congreso  
Charla Oral  
Brasil  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Universidade Estadual da Paraíba- UEPB e Universidade Estadual Paulista ? UNESP  
Áreas de conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacia

#### **VIII Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations (2019)**

Taller  
Charla Invitada  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 50  
Nombre de la institución promotora: Universidad Nacional de la Plata  
Palabras Clave: Estructura Electrónica DFT Novel Methods  
Áreas de conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

#### **XVI Reunión de la SUF 2018 - Sociedad Uruguaya de Física (2018)**

Encuentro  
Nuevos electrolitos sólidos basados en compósitos de polímero y nanotubos inorgánicos para baterías de ión-litio: un estudio teórico-experimental  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 2  
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Física  
Palabras Clave: DFT energía electrolitos  
Áreas de conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ciencia de Materiales y Nanotecnología: Energía

#### **VII Reunión Nacional de Sólidos (2017)**

Congreso  
Estudio teórico y experimental de nanoestructuras de titanato de hidrógeno para aplicaciones en energía  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Áreas de conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados

#### **VII Encuentro de Física y Química de Superficies (2016)**

Encuentro  
Presentación Oral: Propiedades electrónicas en sistemas metal-porfirina  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: CONICET, IFIS, Universidad Nacional del Litoral  
Palabras Clave: Estructura Electrónica Simulación Computacional  
Áreas de conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **2do Encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía (2016)**

Encuentro  
Presentación Oral: El uso de la Dispersión de Debye para el modelado de nanopartículas de alta relación de aspecto  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Palabras Clave: cristalografía nanomateriales y nanotecnología  
Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **Encuentro Regional de Nanotecnología (2016)**

Encuentro  
Nanomateriales para almacenamiento y generación de energía  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 20  
Nombre de la institución promotora: MIEM-PIEP y FAN Palabras Clave: nanomateriales y nanotecnología Energías Renovables  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (2016)**

Congreso  
Theoretical and Experimental Characterization of Single Molecule Diodes  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química, Facultad de Ciencias e IP Palabras Clave: Simulación Computacional nanomateriales y nanotecnología

#### **NANOTECHNOLOGY APPLICATIONS IN WATER AND ALTERNATIVE ENERGIES (2015)**

Taller  
Presentación Oral: Nanomaterials for Energy Applications  
Brasil  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: EU FP7 Project: NMP-DeLA - Deployment of societally beneficial Palabras Clave: Nanotechnology Solar Energy  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

#### **VI Workshop on novel methods for electronic structure calculations (2015)**

Taller  
Presentación Oral: Electronic Structure of Single Molecule Diodes  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: UNLP Palabras Clave: DFT Electronic Structure  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

#### **5o Workshop de Aplicados à Física e Farmácia (2015)**

Taller  
Presentación Oral: Synthesis, Structural Characterization and Simulation of Nanostructured Titanates  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 20  
Nombre de la institución promotora: Universidad Federal de Santa Catarina UFSC Palabras Clave: Electronic Structure Energy  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

#### **Seminarios del Instituto de Física de Facultad de Ciencias (2015)**

Seminario  
Métodos de Estructura Electrónica en Materia Condensada: Aplicaciones en Ciencia de Materiales

y Nanotecnología  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 1  
Nombre de la institución promotora: Instituto de Física de Facultad de Ciencias Palabras Clave:  
DFT Nanotecnología  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales

#### **Cuarto Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2015)**

Encuentro  
Presentación Oral: Síntesis, Caracterización y Simulación de Nanomateriales con Aplicaciones en  
Energía  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química & PEDECIBA Palabras Clave:  
Nanotecnología Energías Renovables  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
nanotecnología y ciencia de materiales

#### **V Workshop on novel methods for electronic structure calculations (2013)**

Taller  
Presentación Oral: Electronic and Vibronic states of CoTPP molecules deposited on Cu<sub>3</sub>N/Cu(110)  
surface  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 30  
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química Palabras Clave: DFT Electronic  
Structure  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Electronic and Vibronic states of CoTPP molecules deposited on Cu<sub>3</sub>N/Cu(110) surface

#### **XIII Reunión de la Sociedad Uruguaya de Física (2012)**

Congreso  
Presentación Oral: Sistemas Donor-metal-Aceptor como foto-absorbentes en el infrarrojo cercano  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Física Palabras Clave: DFT Celdas  
Solares infrarrojo  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura  
Electrónica, DFT

#### **At the Frontiers of Condensed Matter VI (2012)**

Congreso  
Presentación Oral: Electronic and Vibronic states of CoTPP molecules deposited on Cu<sub>3</sub>N/Cu(110)  
surface  
Argentina  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: CNEA Palabras Clave: DFT  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura  
Electrónica, DFT

#### **Simposio Uruguayo de Celebración de 100 años de la Cristalografía Moderna (2012)**

Simposio  
Presentación Oral: Centro de Análisis por Difracción de Rayos X (CADIFRAX): Oportunidades para

la Investigación y el Desarrollo

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA, Facultad de Química Palabras Clave:

crystalografía rayos x de polvo

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Cristalografía

#### **1as Jornadas Uruguayas de Celulas Madres y Medicina Regenerativa (2011)**

Encuentro

Presentación Oral: Desarrollo de matrices colagénicas para el tratamiento de lesiones cutáneas

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Área de Terapia Celular- Medicina Regenerativa, Facultad de

Medicina Palabras Clave: Piel Artificial Colágeno

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica

#### **4th Workshop on novel methods for electronic structure calculations (2011)**

Congreso

Presentación Oral: Mechanical properties of edge-doped graphene nanoribbons

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Universidad de La Plata Palabras Clave: grafeno nanocintas de

carbono

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura

Electrónica, DFT

#### **Workshop on novel methods on electronic structure calculations, and 6th FPLO Workshop (2011)**

Taller

Presentación Oral: Mechanical and electronic properties of edge doped graphene nanoribbons

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Universidad de La Plata. Argentina Palabras Clave:

Nanotecnología grafeno Simulación Computacional

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Materia

Condensada

#### **AFA-SUF 2011 (2011)**

Congreso

Presentación Oral: Estudio teórico y experimental sobre tetrafenilporfirinas de Co depositadas sobre superficies de Cu(110) y Cu<sub>3</sub>N/Cu(110)

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Asociación de Física Argentina- Sociedad Uruguaya de Física

Palabras Clave: DFT tetrafenilporfirinas CoTPP

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura

Electrónica, DFT

#### **At the Frontiers of Condensed Matter V (2010)**

Congreso

Presentación Oral: Electronic and structural distortions in graphene induced by carbon vacancies and boron doping

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Centro Atómico Constituyentes - Comisión Nacional de Energía Atómica Palabras Clave: Nanotecnología grafeno Simulación Computacional  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Materia Condensada

#### **Charla de División (2010)**

Otra  
Presentación Oral: Estructura Electrónica en Nanoestructuras Carbonosas  
Argentina  
Tipo de participación: Expositor oral  
Nombre de la institución promotora: Comisión Nacional de Energía Atómica. Centro Atómico Constituyentes Palabras Clave: DFT Nanotechnology  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotechnology  
Charla en el marco de pasantía realizada en la CNEA-CAC 2010

#### **III Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations (2009)**

Taller  
Presentación Oral: Mechanical and electronic features of carbon nanostructures  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 30  
Nombre de la institución promotora: Universidad de la Plata Palabras Clave: DFT, simulaciones  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación, DFT, nanomateriales  
A tener lugar

#### **V Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía (2009)**

Congreso  
Presentación Oral: Estructura electrónica de nanoestructuras carbonosas.  
Argentina  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 30  
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Cristalografía Palabras Clave: DFT Nanotechnology  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT, nanotecnología

#### **Proyecto Prosul - SÍNTESIS Y ESTUDIO DE CARBONO NANOESTRUCTURADO (2008)**

Taller  
Presentación Oral: Multivacancies on Graphite & Graphite Nanoribbons  
Brasil  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 8  
Nombre de la institución promotora: Univ. Federal de Sao Carlos, Univ. La Plata & UdelaR Palabras Clave: DFT Nanotechnology  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica, DFT, cristalografía

#### **Proyecto PROSUL (2008)**

Taller  
Presentación Oral: Magnetism induced by single atom vacancies  
Brasil  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 10  
Nombre de la institución promotora: Univ. Sao Carlos, Univ. La Plata, UdelaR Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Síntesis,

**93 Reunión Nacional de Física Argentina - XI Reunión de la Sociedad Uruguaya de Física (2008)**

Congreso  
Presentación Oral: Induced localized States in Carbon Nanostructures  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Asociación de Física Argentina - Sociedad Uruguaya de Física  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Caracterización Física de materiales, simulación por primeros principios  
Conferencista invitado, a la división "Materia Condensada" del citado Congreso AFA-SUF

**93 Reunión Nacional de Física Argentina - XI Reunión de la Sociedad Uruguaya de Física (2008)**

Congreso  
Presentación de Poster: Induced localized states in carbon nanostructures  
Argentina  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 10  
Nombre de la institución promotora: Asociación de Física Argentina - Sociedad Uruguaya de Física  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estudio por  
Primeros Principios de Estructura Electrónica  
Presentación de Póster

**IV Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía Bahía Blanca (2008)**

Congreso  
Presentación Oral: IV Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía Bahía Blanca  
Argentina  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Cristalografía Palabras Clave: DFT  
Nanotechnology Crystal structure  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura  
Electrónica, DFT

**Seminarios Generales del IFFI (2008)**

Seminario  
Métodos de Estructura Electrónica en Materia Condensada y sus Aplicaciones: Materiales y  
Nanomateriales  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Nombre de la institución promotora: Instituto de Física de Facultad de Química. Palabras Clave:  
DFT Nanotechnology nanomateriales  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura  
Electrónica, DFT

**Simposio Latino Americano de Polimorfismo y Cristalización en Fármacos y Medicamentos (2007)**

Simposio  
Póster: "Caracterización de polimorfos de interés farmacéutico por difracción de rayos X"  
Brasil  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 2  
Nombre de la institución promotora: Universidad Federal de Ceará Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Caracterización Estructural de polimorfos farmacéuticos  
Presentación de Poster

**Workshop on novel methods on electronic structure calculations, and 6th FPLO Workshop (2007)**

Taller

Presentación Oral: Synthesis and theoretical and experimental study of new ceramics and nano-structured materials

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad Nacional de la Plata - FLPO - CNEa Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación por primeros principios (DFT)

Presentación Oral

#### **Semanal Session - Emerging Materials Group (2006)**

Seminario

Presentación Oral: Synthesis and Study of Carbon Nanostructures

Estados Unidos

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: Materials Science Division / Argonne National Laboratory / Chicago Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Caracterización Física de materiales

Presentación Oral

#### **V Congreso Iberoamericano de Sensores (2006)**

Congreso

Póster: A theoretical model for bulk crystalline magnetic carbon

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 6

Nombre de la institución promotora: UdelaR - ANTEL Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estudio por Primeros Principios de Estructura Electrónica

Presentación de Póster

### **JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS**

#### **Metallic nanostructures prepared by a solid state dewetting process with potential applications in nanophotonics (2021)**

Candidato: Juan Agustín Badán Núñez

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , Enrique Dalchiele , C. NEGREIRA , Samuel Hevia , Rodolfo Jalabert

Doctorado en Física (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Inglés

Palabras Clave: metallic nanoparticles nanophotonics

#### **Evaluación de cristales nanométricos de celulosa como aditivos para mejorar las propiedades mecánicas del papel (2021)**

Candidato: Ignacio Agustín Laborda Turrión

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

FACCIO, R. , CLAVIJO, L. , Fernando Bonfiglio

Maestría en Ingeniería de Celulosa y Papel / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Inglés

Palabras Clave: nanocelulosa propiedades mecánicas nanocristales

#### **Diseño de matrices poliméricas para la degradación de colorantes contaminantes en agua (2021)**

Candidato: Paulina Haller

Tipo Jurado: Pregrado

FACCIO, R.

Licenciado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /

Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Palabras Clave: molecular imprinted polymers

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Polímeros de impresión molecular

**Valorización de subproductos industriales y planteo de nuevos precursores para el crecimiento de CNTs (2020)**

Candidato: Angie Quevedo

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

FACCIO, R. , PORCAL, W. , CAROLINA MENDOZA

Posgrado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / materiales de carbono

**Desarrollo de formulaciones nanoestructuradas portadoras de fenazinas para su aplicación en oncología (2020)**

Candidato: Nicole Lecot

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , DUHAGON MA , H. Durán

Doctorado en Ciencias Médicas (PROINBIO) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / BioNano y Nanomedicina

**Desarrollo de celdas solares híbridas orgánico-inorgánicas de dos tipos: polimérico-inorgánicas y basadas en perovskita (2020)**

Candidato: Loengrid Bethencourt

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , MÉNDEZ AYALA, EDUARDO , TORRES, J

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Celdas Solares

**Propiedades magnéticas de materiales 2D (2020)**

Candidato: Federico Nahuel Escudero

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , Antonio RAMÍREZ PASTOR , Norberto J. CASTELLANI

Doctor en Física / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional del Sur / Argentina

País: Argentina

Idioma: Español

**Preparación y caracterización de monocapas bidimensionales de BiI<sub>3</sub> (2019)**

Candidato: Daiana Ferreira

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

FACCIO, R. , MÉNDEZ AYALA, EDUARDO , I. AGUIAR

Carreras de Facultad de Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Palabras Clave: BiI3

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / BiI3

**Estudio teórico de la adsorción y reacción de especies de arsénico sobre nanopartículas de Fe y bimetálicas de Fe/Me, Me: Pd, Cu, Ni (2019)**

Candidato: Leslie Lisette Alfonso Tobón

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , Graciela P. Zanini , Antonio J. Ramirez Pastor

Doctorado en Ciencia y Tecnología de los Materiales / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional del Sur / Argentina

País: Argentina

Idioma: Español

Palabras Clave: DFT nanopartículas metálicas hierro cero arsénico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

**Estudio de la co-combustión de esquistos bituminosos nacionales y residuos de biomasa (2019)**

Candidato: Martín Torres Brunengo

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , L. ARIZAGA , P. L. CURTO-RISSO

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Palabras Clave: lutitas pirobituminosas co-combustión

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

**Efectos de tamaño en las propiedades físicas y químicas de nanoclústeres metálicos. El rol de las interacciones con óxidos como material de soporte (2019)**

Candidato: Abel Sebastián Maldonado

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R. , Valeria Ferrari , Alfredo Juan

Doctorado en Ciencia y Tecnología de los Materiales / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional del Sur / Argentina

País: Argentina

Idioma: Español

Palabras Clave: nanopartículas de platino fonones dinámica molecular óxido como soporte

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

**ESTUDIO DE LA DOSIS DEPOSITADA POR RADIACIONES IONIZANTES DE TOMOGRAFÍAS COMPUTARIZADAS EN PACIENTES PEDIÁTRICOS (2019)**

Candidato: MARCEL JAVIER FREDERICO ALVAREZ

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

FACCIO, R. , Daniel Enrique Andisco , Luis Dibarbouré

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Radioterapia

**DESARROLLO DE UN INMUNOSENSOR COLORIMÉTRICO PARA DETECCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE EXOSOMAS (2019)**

Candidato: Pablo Fagundez

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

FACCIO, R. , I. MACHADO , GONZALEZ-SAPIENZA, GUALBERTO

Pasaje de Posgrado a Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República

/ Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Nanotecnología / Nanotecnología / Analítica

**ESTUDIO DE PROCESOS DE ADSORCIÓN DESORCIÓN DE FÁRMACOS SOBRE FIBRAS DE CARBÓN ACTIVADO (2019)**

Candidato: Ana Claudia Pina  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R., Ana Ochoa, VÁZQUEZ M  
Pasaje de Posgrado a Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

**DESARROLLO DE PRODUCTOS BIOADHESIVOS TÓPICOS FARMACÉUTICOS Y COSMÉTICOS (2019)**

Candidato: Anibal Torregrosa  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R., CASTIGLIONI, J., IBARRA M  
Pasaje de Posgrado a Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacotécnica

**Conversión de Jacinto de agua para restauración de ecosistemas y provisión de un fertilizante alternativo para el cultivo de especies madereras de rápido crecimiento (2019)**

Candidato: Jorge de Vivo  
Tipo Jurado: Otras  
FACCIO, R.  
Pasaje de Posgrado a Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica  
Corrector de Avance de Estudios de Posgrado de PEDECIBA

**Síntesis y caracterización de electrodos de baterías recargables de NiMH (2019)**

Candidato: Joaquín Díez  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R., ZINOLA, C.F., CERECETTO, H.  
Maestría / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Electroquímica

**PRODUCCIÓN Y ESTUDIO DE COMPÓSITOS DE MADERA PLÁSTICA (2018)**

Candidato: Carolina Pérez  
Tipo Jurado: Pregrado  
FACCIO, R.  
Carrera de Químico / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

**Formulación, síntesis y caracterización de nanosistemas de entrega de drogas anticancerígenas funcionalizados con anticuerpos anti- antígeno Tn (2018)**

Candidato: Analía Castro  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R., Ana Ochoa, PORCAL, W.  
Pasaje de Posgrado a Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Nanotecnología / Nanotecnología

**Propiedades Estructurales, Electrónicas y Magnéticas de la Ferrita de Zinc. Estructura Local y Orden Magnético (2018)**

Candidato: Jhon Jaither Melo Quintero  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
FACCIO, R., Laura C. Damonte, Eitel Peltzer  
DOCTORADO EN CIENCIAS NATURALES / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de la Plata / Argentina  
País: Argentina  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica y Simulación Computacional.

**Estudio de fenómenos de corrosión en alta temperatura y su efecto sobre la confiabilidad de generación en calderas de centrales térmicas (2018)**

Candidato: Lucía Paola Campo Schneider  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R., Eugenia Dalibon, ZINOLA, C.F.  
Maestría en Ingeniería de la Energía / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos

**Estudio de la co-combustión de esquistos bituminosos nacionales y residuos de biomasa (2018)**

Candidato: Martín Miguel Torres Brunengo  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R., SEOANE, G., L. ARIZAGA  
Pasaje de Posgrado a Doctorado / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

**Ensamblaje supramolecular de complejos polinucleares mediante derivados del ácido iminodiacético (2018)**

Candidato: Roberto Puentes  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
FACCIO, R., CHIOZZONE, R., Verónica Paredes García  
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química de Coordinación

#### **Remoción de nutrientes como estruvita en reactor de lecho fluidizado (2018)**

Candidato: Claudia Santiviago Petzoldt

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

FACCIO, R., Gustavo Sanchez, Verónica Bucalá

Doctorado en Ingeniería Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos

#### **Espectroscopía de dos fotones de vapor de rubidio contenido en un medio poroso (2017)**

Candidato: Lucía Amy

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

FACCIO, R., FRINS, E., D. ARIOSA, N. BENECH

Maestría en Física (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química

#### **Evaluación de la resistencia química de cemento portland compuesto elaborado con ceniza de cáscara de arroz residual uruguaya (2017)**

Candidato: María Fernanda Rodríguez

Tipo Jurado: Pregrado

FACCIO, R.

Carrera de Químico / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería de los Materiales / Ingeniería de los Materiales

#### **Estudio computacional de reacciones aza y oxo Diels-Alder empleando cis- ciclohexadienodios de origen microbiano (2017)**

Candidato: Sebastián Martínez

Tipo Jurado: Pregrado

FACCIO, R.

Licenciado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Computacional

#### **Estudio Comparativo de hidroxilamido- y peroxo-compuestos de vanadio(V) desde un abordaje teórico-experimental (2017)**

Candidato: Gabriel Arrambide

Tipo Jurado: Otras

FACCIO, R.

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear

**Levaduras Antárticas como fuente de triglicéridos para la producción de BIODIESEL (2016)**

Candidato: Adalgisa Martínez  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
PIA CERDEIRAS, IVÁN JACHMANIAN, FACCIO, R.  
Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Levaduras  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología

**Ligandos Cromóforos Multifuncionales: Síntesis y Estudio de su Química de Coordinación (2016)**

Candidato: Florencia Luzardo  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
JULIA TORRES, ENRIQUE PANDOLFI, FACCIO, R.  
Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: ligandos cromóforos  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química de Coordinación

**Estudio de catalizadores de níquel preparados por coprecipitación y su aplicación en la producción de hidrógeno mediante reformado de derivados líquidos de la biomasa (2016)**

Candidato: Mauricio Musso  
Tipo Jurado: Otras  
FACCIO, R.  
Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: catalizadores  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica  
Evaluador de informe de Avance de Tesis de Posgrado, PEDECIBA-QUIMICA.

**Estudio de la estabilidad de nanopartículas y desarrollo de un sensor colorimétrico (2016)**

Candidato: Santiago Botasini  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
RICARDO MAROTTI, ANA MARÍA CASTRO LUNA, FACCIO, R.  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Nanotecnología Sensores  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

**SISTEMAS BIOMIMÉTICOS NA SÍNTESE DE NANOPARTÍCULAS DE OURO PARA APLICAÇÕES BIOMÉDICAS E BIOTECNOLÓGICAS (2015)**

Candidato: Jelver Alexander Sierra Restrepo  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
ANDRE AVELINO PASA, CRISTIANI CAMPOS PLÁCID, TÂNIA BEATRIZ CRECZYNSKI-PASA, ALEXANDRE LAGO, GIOVANI ZANGARI, GUILHERME MARIZ DE OLIVEIRA BARRA, FACCIO, R.  
PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS PGMAT / Sector

Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA / Brasil

País: Brasil

Idioma: Portugués

Palabras Clave: nanoparticles green chemistry

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / nanotecnología y ciencia de materiales

#### **Simulación Computacional de Materiales de Interés Nuclear (2015)**

Candidato: Sebastián Jaroszewicz

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

JULIÁN FERNÁNDEZ , SUSANA RAMOS , FACCIO, R.

Doctor en Ciencia y Tecnología, mención Física / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional Genral San Martín / Argentina

País: Argentina

Idioma: Español

Palabras Clave: Simulación Computacional materiales nucleares

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

#### **Estudio de la hidrogenación de aceites comestibles sobre catalizadores metálicos modelo (2014)**

Candidato: Guillermina Gómez

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

REINALDO PIS DIE , MARÍA ALICIA VOLPE , FACCIO, R.

Doctorado en Ciencia y Tecnología de los Alimentos / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional del Sur / Argentina

País: Argentina

Idioma: Español

Palabras Clave: DFT Simulación Computacional hidrogenación

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica - Simulación por Primeros Principios - DFT

#### **Propiedades estructurales y electrónicas de óxidos de tierras raras. Estudio mediante cálculos de primeros principios y técnicas experimentales nanoscópicas (2014)**

Candidato: Diego Richard

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

ANA MARÍA LLOIS , LAURA DAMONTE , FACCIO, R.

Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional de La Plata / Argentina

País: Argentina

Idioma: Español

Palabras Clave: DFT PAC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estructura Electrónica - Simulación por Primeros Principios - DFT

#### **APLICACÃO DE MONTE GARLO REVERSO NA GERAÇÃO DE CONFIGURAÇÕES ESPACIAIS PARA SIMULAÇÕES DE MATERIAIS PARA MEMBRANAS DE CÉLULAS A COMBUSTÍVEL (2014)**

Candidato: Diego Fernando Portaluppi

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

ANDRE AVELINO PASA , IURI STEFANI BRANDT , GUILHERME MARIZ DE OLIVEIRA BARRA , FACCIO, R.

PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS PGMAT / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA / Brasil

País: Brasil

Idioma: Portugués

Palabras Clave: Monte Carlo Reverso Células Combustible

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Nanotecnología y ciencia de materiales: Estructura Electrónica

**Ensamblaje supramolecular de complejos polinucleares mediante derivados del ácido iminodiacético (2013)**

Candidato: Roberto Puentes  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
DINORAH GAMBINO , ENRIQUE PANDOLFI , FACCIO, R.  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Supramolecular iminodiacético  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química supramolecular

**Propiedades Ópticas de Materiales Nanoestructurados: Transmitancia y Fotoluminiscencia (2013)**

Candidato: Javier Pereyra  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
CECILIA STARI , PAULO VALENTE , DANIEL ARIOSIA , RICARDO MAROTTI , FACCIO, R.  
Maestría en Física (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Nanotecnología Óptica fotoluminiscencia  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Óptica

**ESTUDIO SOBRE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELECTRÓNICAS Y MAGNÉTICAS DE MATERIALES DE INTERES TECNOLÓGICO POR MEDIO DE CÁLCULOS CUÁNTICOS (2013)**

Candidato: Arles Víctor Gil Rebaza  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
L. ERRICO , G. CABEZA , FACCIO, R.  
Doctor en Física / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional de La Plata / Argentina  
País: Argentina  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Magnetismo DFT  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / estructura electrónica, nanotecnología

**Estudio de la estabilidad de nanopartículas y desarrollo de un sensor colorimétrico (2012)**

Candidato: Santiago Botasini  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
IRIS MIRABALLES, MOISES KNOCHEN , FACCIO, R.  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Nanotechnology sensor  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología  
Defensa de pasaje a Doctorado

**Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujo de uva (2012)**

Candidato: Marcela Pearce y Antonella Roascio  
Tipo Jurado: Trabajo de conclusión de curso de Grado  
EDUARDO BOIDO , FACCIO, R.  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Antioxidantes orujo  
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / antioxidantes  
Trabajo Experimental de Grado, Carrera de Ing. de Alimentos

#### **Síntesis de Liposomas de Hierro (2012)**

Candidato: Magdalena Irazoqui  
Tipo Jurado: Trabajo de conclusión de curso de Grado  
TOMÁS LÓPEZ , FACCIO, R.  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Liposomas Hierro  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Nanotecnología  
Trabajo Experimental de Grado, Carrera de Ing. de Alimentos

#### **Aplicación de la química computacional al estudio de la adsorción de hidrógeno sobre grafeno y nanotubos de carbono decorados con paladio (2011)**

Candidato: Lic. Ignacio López Corral  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
FACCIO, R.  
Doctorado en Química / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera /  
Universidad Nacional del Sur / Argentina  
País: Argentina  
Idioma: Español  
Palabras Clave: DFT Nanotecnología grafeno energía  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química computacional, nanotecnología, DFT

#### **Recuperación de productos químicos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft. Preparación de modelos de lignina y estructuras relacionadas con potencial sintético. (Defensa de pasaje de estudios a Doctorado) (2011)**

Candidato: Virginia Aldabalde  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
FACCIO, R.  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Palabras Clave: Kraft lignina Síntesis Orgánica  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis Orgánica  
Defensa de proyecto de Tesis para pasaje a Estudios de Doctorado en Química

#### **ESTUDO DE MOLÉCULAS DE PORFIRINA ISOLADAS EM SUPERFÍCIES CRISTALINAS POR STM DE BAIXA TEMPERATURA (2010)**

Candidato: Vinícius Claudio Zoldan  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
FACCIO, R.  
PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS PGMAT / Sector  
Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA  
CATARINA / Brasil  
País: Brasil  
Idioma: Portugués  
Palabras Clave: Materiales, Estructura electrónica, nanotecnología  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /  
Nanotecnología, DFT

#### **CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL**

Soy Coordinador del Área Química del PEDECIBA desde el año 2017, en dos periodos consecutivos.  
Se ha adquirido difractor de Polvo Institucional de Facultad de Química en 2020 mediante proyecto de

equipamiento de CSIC.

Mis tareas de investigación se enfocan a desarrollar la Nanotecnología a nivel nacional, tanto a nivel teórico como experimental.

Se ha introducido la línea de investigación de materiales para almacenamiento de energía, baterías de ión-litio, al país.

He incorporado al país la herramienta de Microscopia Raman Confocal, mediante llamado de ANII.

He contribuido a consolidar equipamiento de alto porte vinculado a dirección de rayos X.

Se han realizado numerosos cursos de grado y posgrado vinculados a nanotecnología y materiales.

Se han desarrollado varias tesis de posgrado, interdisciplinarias, para potenciar la caracterización de materiales mediante la técnica.

Se ha consolidado la oferta de servicios al nivel productivo, realizando más de 530 asesoramientos, más de 270 en los últimos 5 años.

## Información adicional

Kits-Covid para atender la pandemia:

Integrante de grupo interdisciplinario entre FQ, FING, FADU y ECDU-UdelaR, diseño y evaluación de hisopos para toma de muestras virales. Prototipo en evaluación para habilitación por parte MSP, a través de convenio FQ-MSP 2020.

Transferencias Tecnológicas:

Hisopo Cabezal de Silicona: transferencia tecnológica UdelaR/Gomsil Ltda. Para la producción de hisopos de cabezal de silicona. Responsable técnico del convenio. Registro ante MSP el 22/12/2020.

Integrantes de Comité Científicos de Congresos Internacionales.

9th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices (LDSD 2019)?, Puerto Varas, Chile. 2-6 December 2019. (<http://www.ldsd2019.org>). Member of International advisory committee.

XXIII Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES XXIII)?, Bariloche, Argentina, 10-13 abril de 2018. Integrante del Comité Científico Internacional.

Organización de Eventos y Escuelas Internacionales:

Presidente del Comité Organizador de la VIII Reunión Nacional de Sólidos (Argentina) y Primer Encuentro Bi-Nacional de Sólidos, Montevideo del 20 al 22 de Noviembre de 2019.

Presidente del Comité Organizador del "VI Encuentro Nacional de Química: ENAQUI6", PEDECIBA, Octubre, 2019.

Comité Científico "The 9th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices", Puerto Varas (Chile), 2-6 December 2019.

Comité Científico del "Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido - SLAFES XXIII", Bariloche, Abril 2018.

Co-Organizador del congreso internacional "QUITEL 2016, the Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression", Diciembre 2016, Montevideo, Uruguay.

Co-Organizador del encuentro regional "VI Workshop on novel methods for electronic structure calculations", Diciembre 2015, La Plata, Argentina.

Co-Organizador del "WORKSHOP REGIONAL BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL", 16 al 28 de Marzo 2015, Montevideo, Uruguay.

Co-Organizador del "WORKSHOP INTERNACIONAL: Bases de la Nanociencia y la Nanotecnología?", 13 al 24 de Octubre 2014, Montevideo, Uruguay.

Organizador del encuentro regional "V Workshop on novel methods for electronic structure calculations", Diciembre 2013, Montevideo, Uruguay.

Integrante del Comité Organizador y Comité Científico del "II Congreso Interdisciplinario de Nanotecnología y Biomateriales", 16 y 17 de Octubre de 2013, Montevideo, Uruguay.

<http://www.cosue2013.uy/nanotecnologia.asp>.

Coordinador de la División Materia Condensada (DMC) de la "II Reunión Conjunta SUF-AFA (XII Reunión de la SUF y 96ª Reunión Nacional de la AFA)". 20 al 23 de septiembre de 2011.

Montevideo, Uruguay.

Integrante del Comité Organizador del "IV Workshop on novel methods for electronic structure calculations and 2nd Latin American school on computational materials science", Octubre 2011, La Plata, Argentina.

Miembro del Comité Organizador de la "International School on Fundamental Crystallography", noviembre-diciembre de 2010, Montevideo, Uruguay.

Integrante del Comité Organizador y Comité Científico del "I Congreso Internacional de Nanotecnología y Biomateriales", noviembre de 2010, Montevideo, Uruguay.

Gestión de Servicios:

En los últimos años el suscrito ha realizado más de 530 asesoramientos al sector productivo nacional utilizando Difracción de Rayos X de Polvo y Microscopia Raman Confocal. Desempeñándose en áreas muy variadas, tales como: Polimorfismo en fármacos (técnica sugerida por la Food and Drug Administration), estudios de mezclas complejas, etc. Integrante del grupo de trabajo encargado de la elaboración del capítulo de Difracción de Rayos X para ser incluido en la próxima Farmacopea Argentina. Responsable de gestión del proceso de habilitación del laboratorio CADIFRAX ante el Ministerio de Salud Pública, en materia de difracción de rayos X de polvo para principios activos.

#### Gestión Docente:

En el marco de la participación de la Sub-Comisión de Educación Técnica Terciaria, el suscrito a participado en la elaboración de planes de estudio. En particular en el de la Carrera "Tecnólogo Agroenergético", recientemente aprobado por los Claustros de la Facultad de Química e Ingeniería. En el marco de la participación de la Comisión de Carrera del "Tecnólogo Químico", el suscrito a participado en la gestión docente del mismo, siendo miembro de múltiples comisiones asesoras de mérito, y generando aportes en la mejora de la citada carrera.

#### Otros:

Member of TAPPI Nanotechnology Division, sub-committee "Characterization, Metrology and Critical Fundamentals" <https://www.tappinano.org>

Punto Focal en el Área de Energías representando a la ANCIU ante Inter-American Network of Academies of Sciences (IANAS). <https://ianas.org/activities/ianas-energy-program/>

Miembro invitado de la American Nano Society, <http://members.nanosociety.us/rfaccio>, 2011.

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>330</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	215
Completo	214
Reseña	1
<b>Trabajos en eventos</b>	106
<b>Libros y Capítulos</b>	6
Capítulos de libro publicado	6
<b>Textos en periódicos</b>	3
Periódicos	3
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>6</b>
<b>Productos tecnológicos</b>	2
Con registro o patente	1
<b>Procesos o técnicas</b>	1
<b>Otros tipos</b>	3
<b>EVALUACIONES</b>	<b>189</b>
<b>Evaluación de proyectos</b>	27
<b>Evaluación de eventos</b>	14
<b>Evaluación de publicaciones</b>	128
<b>Evaluación de convocatorias concursables</b>	3
<b>Jurado de tesis</b>	17

<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>42</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	<b>38</b>
Tesis/Monografía de grado	5
Iniciación a la investigación	3
Otras tutorías/orientaciones	7
Tesis de doctorado	11
Docente adscriptor/Practicantado	7
Orientación de posdoctorado	5
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b>	<b>4</b>
Tesis de doctorado	3
Tesis de maestría	1