



**SANTIAGO VÁZQUEZ
CUADRIELLO**

Curriculum

santivazquez@fq.edu.uy

SNI

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

Fecha de publicación: 18/09/2018
Última actualización SNI: 18/09/2018

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química - UDeLaR/ Cátedra de Física, DETEMA / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Sector Educación Superior/Público

Dirección: Av. Gral Flores 2124 / 11800 / Montevideo, Montevideo, Uruguay

Teléfono: (598) 29290648

Correo electrónico/Sitio Web: santivazquez@fq.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

GRADO

Ingeniería Química (2007 - 2013)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Título de la disertación/tesis: Planta de Reciclado y Elaboración de Alambre de Cobre para Fabricar Conductores Eléctricos

Tutor/es: Ing. Raúl Prando e Ing. Mario Furest

Obtención del título: 2013

Palabras Clave: Ingeniería Química

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos /

EN MARCHA

DOCTORADO

Doctorado en Química (2013)

Universidad de la República, Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Título de la disertación/tesis: PREPARACIÓN, SIMULACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES NANOESTRUCTURADOS PARA ELECTRODOS DE CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO DE TEMPERATURA INTERMEDIA (IT-SOFC)

Tutor/es: Dr. Leopoldo Suescun y Dr. Ricardo Faccio

Institución financiadora: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay

Palabras Clave: SOFC DRX DFT EIS

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Nanotecnología / Nano-materiales / Preparación y caracterización de nanomateriales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Cálculos ab initio utilizando Density Functional Theory (DFT)

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Responsable de Gestión de Calidad y Competencia Técnica en Laboratorios de Ensayos y Calibraciones (01/2016 - 01/2016)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA , Uruguay

24 horas

Palabras Clave: ISO 17025

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Gestión de Calidad

Conversation module for Intermediate Level (01/2015 - 01/2015)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Instituto ANGLO Uruguay , Uruguay

40 horas

Microscopia Raman Confocal Aplicada a la Caracterización de Materiales (01/2015 - 01/2015)

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

40 horas

Palabras Clave: raman microscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Caracterización de materiales

Anodización de superficies metálicas y sus aplicaciones (01/2015 - 01/2015)

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

15 horas

Palabras Clave: Electroquímica Procesos tecnológicos

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Ingeniería Electroquímica

Herramientas estratégicas y Desarrollo Organizacional (IMOE) (01/2014 - 01/2014)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA , Uruguay

24 horas

Palabras Clave: Gestión de Calidad

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Gestión de Calidad

Auditor en Sistemas de Gestión (QMA) (01/2014 - 01/2014)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA , Uruguay

40 horas

Palabras Clave: Auditor

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Auditor

Resolución de estructuras cristalinas por difracción de rayos X de monocristal (01/2014 - 01/2014)

Sector Extranjero/Internacional/Organismos internacionales / Organismos Internacionales / Organización de Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura , Uruguay

40 horas

Palabras Clave: Cristalografía

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Implementación de los Sistemas de Gestión Integrados (IMSIA) (01/2014 - 01/2014)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA , Uruguay

24 horas

Palabras Clave: Gestión de Calidad

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Gestión de Calidad

Métodos Estadísticos para la toma de decisiones (QME) (01/2014 - 01/2014)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA , Uruguay

32 horas
Palabras Clave: Gestión de Calidad
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Gestión de Calidad

Membranas Poliméricas para células a combustible (01/2014 - 01/2014)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
25 horas
Palabras Clave: Polímeros Celda de Combustible
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Polímeros

Sistemas de Gestión de Calidad, según ISO 9000 (QMS) (01/2014 - 01/2014)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA, Uruguay
24 horas
Palabras Clave: Gestión de Calidad
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Gestión de Calidad

Bases para los Sistemas de Gestión Integrados IMS (01/2014 - 01/2014)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / LSQA, Uruguay
32 horas
Palabras Clave: Gestión de Calidad
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Gestión de Calidad

Preparación y Simulación de nanomateriales (01/2013 - 01/2013)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
Palabras Clave: DFT Nanomateriales
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Simulación
de materiales
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Técnicas de
síntesis

Materiales para la conversión y almacenamiento de energía (01/2013 - 01/2013)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
15 horas
Palabras Clave: Celdas de Combustible
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica /

Curso de Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFC) (01/2012 - 01/2012)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
30 horas
Palabras Clave: Materiales para Celdas de Combustible Cristalografía
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Materiales
Tecnológicos

International School on Fundamental Crystallography (01/2012 - 01/2012)

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Universidade Federal de Uberlândia, Brasil
Palabras Clave: Cristalografía
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Difracción en Materiales Policristalinos: Rayos X y Neutrones (01/2011 - 01/2011)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro, Argentina
60 horas

Palabras Clave: Cristalografía Rietveld

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Estudio de la estructura cristalina por difracción de rayos X y neutrones

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

42th Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL) (2016)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Facultad de Química - Universidad de la República, Uruguay

Palabras Clave: DFT Ab initio calculations Quantum chemistry

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Vth Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations (2015)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Universidad de la Plata (UNLP), Uruguay

Palabras Clave: DFT Ab initio calculations Quantum chemistry

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Simulación de propiedades de materiales por cálculos ab initio

4to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI4) (2015)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Facultad de Química - Universidad de la República, Uruguay

Palabras Clave: Química

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Técnicas de caracterización
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nuevos materiales y técnicas de caracterización
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis de nuevos
compuestos

1er Encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía (RUCr) (2014)

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: Facultad de Química - Universidad de la República, Uruguay

Palabras Clave: Cristalografía

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

I Reunión Latinoamericana de Cristalografía y IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía (2013)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Universidad Nacional de Córdoba - Argentina, Argentina

Palabras Clave: Difracción de Rayos X y Neutrones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

II Taller de la Asociación Argentina de Cristalografía - Técnicas Neutrónicas para Caracterización de Materiales (2013)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Universidad Nacional de Córdoba - Argentina, Argentina

Palabras Clave: Difracción de Neutrones

Áreas de conocimiento:

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

V Workshop on novel methods for electronic structure calculations (2013)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Cryssmat-Lab/DETEMA - Facultad de Química - Universidad de la República, Uruguay

Palabras Clave: DFT Ab initio calculations

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

I Taller de la Asociación Argentina de Cristalografía - Técnicas de Luz Sincrotrón para Caracterización de Materiales (2012)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Universidad Nacional del Litoral - Santa Fe, Argentina

Palabras Clave: Radiación Sincrotrón Caracterización de materiales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

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

Caracterización de materiales por técnicas de luz sincrotrón

Simposio Uruguayo de Celebración de 100 años de la Cristalografía Moderna (2012)

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Cryssmat-Lab/ Facultad de Química - Universidad de la República, Uruguay

Palabras Clave: Cristalografía

Áreas de conocimiento:

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

Caracterización de materiales por técnicas de rayos X

VIII Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía (2012)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Universidad Nacional del Litoral - Santa Fe, Argentina

Palabras Clave: Difracción de Rayos X y Neutrones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

VII Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía (2011)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Instituto Balseiro, Argentina

Palabras Clave: Cristalografía Difracción de Rayos X y Neutrones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Difracción de muestras policristalinas

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Idiomas

Español

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

Inglés

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

Portugués

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

Áreas de actuación

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Ingeniería Química / Ingeniería Química / Producción de neumáticos

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Ingeniería Química /Ingeniería de Procesos Químicos /Desarrollo de alimentos y escalado de procesos

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Otras Ciencias Naturales /Otras Ciencias Naturales /Nanotecnología

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Ingeniería Química /Ingeniería Química /Producción de aceros

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Ingeniería Química /Ingeniería de Procesos Químicos /Desarrollo de catalizadores

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Otras Ciencias Naturales /Otras Ciencias Naturales /Química teórica

Actuación profesional

SECTOR EMPRESAS/PRIVADO - EMPRESA PRIVADA - URUGUAY

LSQA

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (04/2014 - a la fecha)

Auditor ,10 horas semanales

ACTIVIDADES

SERVICIO TÉCNICO ESPECIALIZADO

(04/2014 - a la fecha)

LSQA, Certificación de productos
4 horas semanales
Areas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Auditor

(04/2014 - a la fecha)

LSQA, Certificación de productos
4 horas semanales
Areas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Auditor

(01/2015 - a la fecha)

LSQA, Certificación de productos
2 horas semanales
Areas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Auditor

(01/2015 - a la fecha)

LSQA, Certificación de productos
4 horas semanales
Areas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Auditor

(01/2015 - a la fecha)

LSQA, Certificación de productos
4 horas semanales
Areas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Auditor

SECTOR GOBIERNO/PÚBLICO - LABORATORIO TECNOLÓGICO DEL URUGUAY - URUGUAY

Laboratorio Tecnológico del Uruguay

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (08/2016 - a la fecha)

Ingeniero en la Gerencia de I+D+i ,20 horas semanales

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Valorización de subproductos de la industria para el desarrollo de alimentos (08/2016 - a la fecha)

Desarrollo de procesos industriales en escala piloto y/o industrial. Evaluación de rendimiento y costos asociados al proceso. Conducir y participar en la investigación aplicada. Adaptar tecnologías y/o procesos tecnológicos de manera de contribuir a la creación de conocimiento, desarrollo y aplicación de la tecnología hacia los clientes

20 horas semanales

Gerencia de I+D+i

Desarrollo

Integrante del Equipo

En Marcha

Equipo:

Palabras clave: Alimentos

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Escalado de procesos

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

Facultad de Química - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (06/2016 - a la fecha)

Colaborador Honorario ,6 horas semanales

Escalafón: No Docente

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (09/2014 - 05/2016)

Asistente de Física ,40 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (07/2012 - 09/2014)

Ayudante de Física ,40 horas semanales

Como ayudante estaba a cargo de alguno de los horarios de clases prácticas (ejercicios) de las materias Física 101 (Mecánica Clásica), Física 102 (Electromagnetismo), Física 003 y 103 (Laboratorios de Física). A su vez participaba en las instancias de preparación, corrección y cuidado de los parciales y exámenes de estas materias. Colaboraba en la ejecución de asesoramientos de Difracción de Rayos X y estaba dedicado a trabajar en las líneas de investigación de materiales.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (04/2011 - 07/2012)

Ayudante del Laboratorio de Cristalografía ,25 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

Otro (05/2011 - 05/2012)

Ayudante Honorario de Física ,6 horas semanales

Escalafón: No Docente

Cargo: Interino

Otro (03/2011 - 03/2012)

Ayudante Honorario del Laboratorio de Cristal ,6 horas semanales

Escalafón: No Docente

Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Preparación y caracterización de electrodos para SOFCs (04/2011 - a la fecha)

Preparación y estudio por técnicas químicas/físicas de nuevos materiales para electrodos de Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFCs)

Aplicada

2 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Cryssmat-Lab/DETEMA, Integrante del equipo

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN , SEBASTIÁN DAVYT

Palabras clave: SOFC Celdas de Combustible

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Diseño de catalizadores por métodos de Química Teórica (01/2013 - a la fecha)

Se estudian materiales en bulk o nanoestructuras por métodos de Química Teórica (DFT, cálculos ab initio) con el objetivo de predecir o explicar la actividad en la catálisis de reacciones químicas. Este tipo de cálculos permite analizar las propiedades del bulk (estructura electrónica, tensiones, energía, vibraciones, defectos) y propiedades de la superficies (adsorción, disociación de moléculas, determinación de barreras de activación, etc).

Mixta

10 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Cryssmat-Lab/DETEMA, Integrante del equipo

Equipo: R. FACCIO

Palabras clave: Ciencia de Materiales Química teórica Catálisis Nanotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Estudio teórico de nanoestructuras de DMT para aplicaciones tecnológicas (01/2015 - a la fecha)

La nanotecnología ha demostrado que el tamaño de los materiales y su dimensionalidad pueden cambiar drásticamente las propiedades del mismo. Un mismo nanomaterial puede presentar diferentes propiedades dependiendo de la dimensionalidad que posea su ordenamiento atómico (nanoestructuras con 0D, 1D, 2D o 3D). Las características sin precedentes que demostraron el grafeno y los nanotubos de carbono han conmocionado a la comunidad científica generando retos a la hora de estudiar estos sistemas y explicar su comportamiento. El avance en las técnicas de preparación de nanomateriales ha llevado a que recientemente materiales como los dicalcogenuros de metales de transición (DMT), como el MoS₂, hayan podido prepararse en formas de monocapas, nanotubos y otras morfologías. Estas nanoestructuras han demostrado altas conductividades electrónicas, altos coeficientes de Seebeck y bajas conductividades térmicas lo que las vuelve prometedoras para aplicaciones termoeléctricas. Debido al fuerte interés tecnológico los estudios teóricos utilizando cálculos ab initio para predecir el desempeño termoeléctrico se vuelven muy interesantes y la temática surge en la actualidad como un hot topic en ciencia de materiales.

Mixta

2 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Cryssmat-Lab/DETEMA, Integrante del equipo

Equipo: R. FACCIO , BENJAMÍN MONTENEGRO

Palabras clave: Ciencia de Materiales Energía Nanotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Estructura electrónica de sistemas semiconductor-tinta para uso en aplicaciones de energía solar. (03/2015 - a la fecha)

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 , Cryssmat-Lab/DETEMA

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:4

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Cooperación

Equipo: R. FACCIO (Responsable) , BENJAMÍN MONTENEGRO , IGNACIO LÓPEZ-CORRAL , GRACIELA BRIZUELA

Palabras clave: DFT Nanomateriales y nanotecnología Celdas Solares Cálculos ab initio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Química teórica

Nanomateriales para almacenamiento de energía: nueva serie de cátodos para baterías de ion-Litio. (03/2015 - a la fecha)

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 LiFePO₄. 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 LiFePO₄, 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.

6 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República , Cryssmat-Lab/DETEMA

Desarrollo

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Doctorado:4

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero
Equipo: MARIANO ROMERO, HELENA PARDO, I. LABORDA, L. FERNANDEZ, R. FACCIO
(Responsable), SEBASTIÁN DAVYT, V. DÍAZ, BENJAMÍN MONTENEGRO, ERIKA TÉLIZ,
FERNANDO ZINOLA, ÁLVARO W. MOMBRÚ, LETICIA DONATTI
Palabras clave: Energía Baterías de Litio
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /
Nanotecnología y ciencia de materiales

Desarrollo de Celdas de Combustible de Óxido Sólido de Temperatura Intermedia (IT-SOFC) con tecnología nacional. Parte II: Diseño, preparación y evaluación de nuevos Ánodos y pares Ánodo-Electrolito para IT-SOFCs. (03/2014 - 03/2016)

La diversificación de la matriz energética nacional es una condición necesaria para asegurar la independencia energética a futuro. Las Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFC) son sistemas de generación eficiente de energía a partir de hidrógeno o hidrocarburos que duplican en eficiencia a los sistemas de generación térmica (motores de combustión o usinas termoeléctricas) basados en el mismo combustible. Las SOFC pueden ser utilizadas para generación energética tanto en sistemas estáticos (de alta potencia) como móviles (de media y baja potencia de operación en períodos prolongados) mediante la provisión permanente de combustible y aire generando energía a un costo económico y ambiental inferior. Esta tecnología es además la más adecuada para la transición a la economía del hidrógeno (no disponible en forma económica en el corto plazo) ya que estos sistemas son capaces de funcionar con ambos tipos de combustibles sin modificaciones sustantivas, por lo que la tecnología a utilizar seguirá vigente en el largo plazo. El grupo del Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales de la Cátedra de Física/DETEMA propone continuar la investigación comenzada en 2010 sobre cátodos de SOFC (encargados de la reducción de oxígeno en la celda) focalizándose ahora en el estudio de los ánodos de SOFC, que son los que interactúan con el combustible. En este nuevo proyecto de 2 años de duración se propone diseñar, preparar y caracterizar nuevos materiales basados en las estructuras de fluorita y perovskita (incluyendo composites cerámico-cerámico o cerámico-metal) micro y nanoestructurados y compararlos con los materiales clásicos (cer-met de Ni-YSZ y Ni-CGO) utilizados en ánodos de SOFC. Esta segunda etapa del proyecto a largo plazo comenzado en 2010 dejará al grupo proponente en condiciones de afrontar la construcción y caracterización completa de nuevas Celdas de Combustible de Óxido Sólido con tecnología y conocimientos nacionales.

20 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Cryssmat-Lab/DETEMA

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Maestría/Magister:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN (Responsable), SEBASTIÁN DAVYT, NICOLÁS ESTEFAN

Palabras clave: SOFC Celdas de Combustibles

Áreas 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 AB₂ and AB₅ 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 AB₂ phases with the following composition: Zr{Cr_{1-x}MoxNi} (x=0.0, 0.3, 0.6 and 1.0). The preliminary results indicate that the alloys possess two phases: AB₂ (space group P63/mmc, with a=8776;5.1Å and c=8.3Å) and binary alloys Ni_xZr

($x=10-11$ 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 %H₂ composition).

40 horas semanales

Laboratorio Nacional de Luz Sincrotron (LNLS) - Campinas, Brasil

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Laboratório Nacional de Luz Sincrotron, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: R. FACCIO (Responsable) , V. DÍAZ , ERIKA TÉLIZ

Palabras clave: Almacenamiento de hidrógeno

Areas de conocimiento:

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

Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Structural characterization of cobalt and barium-free perovskite cathodes for IT-SOFC cathodes (10/2013 - 11/2013)

The generation of energy by clean, efficient and environmental-friendly methods is today's challenge for scientists and engineers. Solid Oxide Fuel Cells (SOFC) are electrochemical devices that appear as an alternative that complies with these requirements since they convert chemical energy of a fuel directly into electrical work, and are efficient and environmentally clean, since no combustion is required. Recently new iron-based perovskite MIECs doped with copper, such as Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-δ} and Sm_{1-x}Sr_xFe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-δ} have been reported showing good performances. The iron-based perovskite oxide tends to have less flexible redox behavior than cobaltites but the incorporation of divalent and trivalent Cu ions can lead to an increase of oxygen vacancies and increase electrochemical activity. We have synthesized a series of oxygen-deficient perovskites based on Fe and Cu, with a mixture of rare earth/transition metal in the A site of the perovskite structure. The general formula of these compounds is Ln_{0.6}Sr_{0.4}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-δ} (with Ln= La, Pr, Nd, Sm and Gd). We have performed a preliminary room-temperature structural characterization by x-ray powder diffraction (see figure) confirming that the structure of the compounds is a pseudo-cubic perovskite with disordered oxygen vacancies and we have studied the electrochemical performance of these materials for IT-SOFC applications showing a high activity in the intermediate and low temperature ranges (450-700°C with ASR between 7.141 Ω/cm² and 0.033 Ω/cm²). We need to perform the complete structural characterization at operation temperatures in order to assess structural changes including non-stoichiometric content. This structural characterization with temperature should allow to determine the structural stability of the compound in SOFC operation conditions and also obtain the thermal expansion coefficient of the materials in order to assess the mechanical compatibility of the compounds with common IT-SOFC electrolytes.

40 horas semanales

Laboratorio Nacional de Luz Sincrotron (LNLS) - Campinas, Brasil

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Financiación:

Laboratório Nacional de Luz Sincrotron, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: R. FACCIO (Responsable) , SEBASTIÁN DAVYT

Palabras clave: SOFC Difracción de Rayos X Celdas de Combustible

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Desarrollo de Celdas Combustibles de Óxido Sólido (SOFC) con tecnología nacional Parte I: Diseño y evaluación de nuevos Cátodos y pares Cátodo-Electrolito para SOFCs (03/2011 - 03/2013)

La diversificación de la matriz energética nacional es necesaria para mantener la independencia energética y sostener el desarrollo económico del país a mediano y largo plazo. Si bien en el largo plazo es posible esperar una economía basada mayoritariamente en el hidrógeno como medio de generación energética esto no es esperable durante los próximos 30 a 50 años. Las mayores dificultades que existe en la actualidad para la rápida introducción del hidrógeno en la economía, que depende globalmente de combustibles fósiles, son el alto costo asociado y largo tiempo requerido para la sustitución o adaptación de la infraestructura necesarias que incluye fabricación

de vehículos, producción masiva y segura del combustible e implementación de una red de distribución y abastecimiento. Una alternativa viable para comenzar la diversificación y el paulatino ingreso a la economía del hidrógeno a escala global es la inicial sustitución de hidrocarburos pesados (carbón, petróleo, naftas, aceites) por hidrocarburos livianos como metano obtenidos de fuentes fósiles (gas natural o a través de procesamiento de hidrocarburos pesados) o alternativas como el biogás, para la generación estática o móvil de energía utilizando dispositivos de mayor eficiencia que los medios de generación actuales. Basados en la experiencia adquirida en la última década por integrantes del Cryssmat-Lab. y el interés existente en jóvenes ingenieros y estudiantes de Facultad de Química se propone la primera etapa de un proyecto a 6 años que culminará con la producción y caracterización de Celdas Combustibles de Oxido Sólido (SOFC) con conocimiento y tecnología nacional. En esta primera etapa se encarará el diseño, preparación y caracterización de materiales para cátodo y electrolito de SOFC y pares cátodo-electrolito. Posteriormente se estudiarán el ánodo y su relación con el resto de la celda para concluir el proyecto de largo alcance en la producción y testeo de una SOFC producida completamente con conocimiento local.

20 horas semanales

Facultad de Química - Universidad de la República, Cryssmat-Lab/DETEMA

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN (Responsable), SEBASTIÁN DAVYT

Palabras clave: SOFC Celdas de Combustible

Areas de conocimiento:

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

Nanotecnología y Ciencia de Materiales

Structural characterization of La_{0.8}Ba_{0.2}Cu_{1-x}(Fe/Co/Ni)_xO_{3-d} materials at operation temperatures. (04/2012 - 05/2012)

Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs) are considered an important and efficient alternative energy source for static and long run mobile applications [1]. Current research in SOFCs is focused on lowering the operation temperature from the traditional 800-1000 ±C range to 600-800 ±C, the so-called Intermediate Temperature or IT-SOFCs. Challenges are manyfold, new materials have to be designed, prepared and tested to be electrochemically active and chemically and mechanically stable for the cathode, electrode and anode of the cell. The state of the art electrolyte materials for IT-SOFCs are Gd₂O₃ and Sm₂O₃ doped CeO₂ (called CGO and CSO) showing adequate ionic conductivity at temperatures as low as 600 ±C, therefore new cathode and anode materials have to be produced to be compatible with it. We are preparing a series of perovskite-type oxides based on the traditional La₄BaCu₅O_{13+d} material by doping the Cu site with other transition metals for testing as possible cathodes for IT-SOFCs. Preliminary results indicate that these materials with general formula La₄BaCu_{5-x}M_xO_{13+d} show an orderdisorder phase transition with x where the oxygen-vacancy ordered tetragonal phase present for low x changes into an oxygen-vacancy disordered phase for higher x depending on M. The high x phase is cubic or pseudo-cubic (orthorhombic Pnma or rhombohedral R3C) also depending on M. We are interested in investigating the properties of both ordered and disordered phases as possible IT-SOFC cathodes since both types of phases show mobile oxygen vacancies (nonstoichiometry of oxygen) as well as good electric conductivity [2]. Characterization of chemical stability of this materials with CGO was performed by X-ray powder diffraction at our in-house diffractometer while the determination of phase stability (presence of order-disorder or other kind of phase transitions) and thermal expansion coefficient (TEC) was performed by thermodiffraction at the LNLS on different compositions (M cations Fe and Co for x · 3:5) as shown in this report.

40 horas semanales

Laboratorio Nacional de Luz Sincrotron (LNLS) - Campinas, Brasil

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Laboratório Nacional de Luz Sincrotron, Brasil, Apoyo financiero

Equipo: LEOPOLDO SUESCUN (Responsable), SEBASTIÁN DAVYT

Palabras clave: SOFC Celdas de Combustible

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y Ciencia de Materiales

DOCENCIA

Licenciatura en Química (07/2013 - 12/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

Química (07/2013 - 12/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

Ingeniería de Alimentos (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Ingeniería Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Licenciatura en Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Química Farmacéutica (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Bachiller en Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Bioquímica Clínica (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Ingeniería de Alimentos (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Ingeniería Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente

Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Licenciatura en Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Química Farmacéutica (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Bachiller en Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 103 - Laboratorio, 4 horas, Teórico-Práctico

Ingeniería de Alimentos (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 103 - Laboratorio, 4 horas, Teórico-Práctico

Ingeniería Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 103 - Laboratorio, 4 horas, Teórico-Práctico

Bioquímica Clínica (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 003 - Física de laboratorio, 4 horas, Teórico-Práctico

Química Farmacéutica (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 003 - Física de laboratorio, 4 horas, Teórico-Práctico

Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 101 - Mecánica Clásica, 4 horas, Práctico

Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Química (07/2012 - 05/2016)

Grado

Asistente
Asignaturas:
Física 103 - Laboratorio, 4 horas, Teórico-Práctico

Química (01/2014 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Cri 01 - Cristalografía, 4 horas, Teórico-Práctico

Química (01/2014 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Cri03 - Física del Estado Sólido, 4 horas, Teórico-Práctico

Bachiller en Química (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Bioquímica Clínica (07/2012 - 05/2016)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Física 102 - Electromagnetismo, 4 horas, Práctico

Bachiller en Química (07/2013 - 12/2014)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

Bioquímica Clínica (07/2013 - 12/2014)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

Ingeniería de Alimentos (07/2013 - 12/2014)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

Ingeniería Química (07/2013 - 12/2014)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

Química Farmacéutica (07/2013 - 12/2014)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Matemática ABC, 4 horas, Teórico-Práctico

EXTENSIÓN

(08/2014 - 08/2014)

Escuela Militar, Toledo - República Oriental del Uruguay, Ciclo de conferencias de la escuela militar
2014
2 horas

(04/2014 - 04/2014)

ANII, TRAMA Proyecta
2 horas

(08/2012 - 08/2012)

Liceo N° 1, "MARIO W. LONG", Rio Negro, Uruguay
4 horas

SERVICIO TÉCNICO ESPECIALIZADO

(07/2012 - 05/2016)

Facultad de Química - Universidad de la República, Laboratorio CADIFRAX
4 horas semanales

PASANTÍAS

(09/2013 - 10/2013)

Centro Atómico Bariloche - Argentina, Grupo Caracterización de materiales
40 horas semanales

(03/2013 - 04/2013)

Centro Atómico Bariloche - Argentina, Grupo Caracterización de materiales
40 horas semanales

GESTIÓN ACADÉMICA

Integrante (10/2014 - 05/2016)

Facultad de Ingeniería/Facultad de Química - Universidad de la República, Comisión de carrera de Ingeniería Química
Gestión de la Enseñanza

Integrante (10/2014 - 05/2016)

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

Representante (electo) de los Grados 1 y 2 (08/2013 - 05/2016)

Facultad de Química - Universidad de la República, Comisión del DETEMA
Participación en cogobierno

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas
Carga horaria de investigación: 20 horas
Carga horaria de formación RRHH: Sin horas
Carga horaria de extensión: Sin horas
Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

En el año 2011 comencé mi carrera en investigación en el grupo del Cryssmat-Lab/Cátedra de Física de Facultad de Química. Mis primeros trabajos fueron en el área de Ciencia de Materiales sintetizando nuevos materiales y estudiándolos mediante técnicas de caracterización físico/químicas. En particular comencé investigando materiales cerámicos para su uso en Celdas de Combustibles de Oxido Sólido (SOFCs). Las SOFCs son sistemas de generación de energía con muy altas eficiencias (>50%), que a diferencia de otras celdas de combustible pueden ser alimentadas

con H₂, hidrocarburos, alcoholes, biomasa, etc. Por tanto serían una tecnología muy adecuada para Uruguay. Su problema radica en los altos costos de sus materiales y por tanto la I+D son vitales para el éxito de esta tecnología. Luego de recibirme como Ingeniero Químico en 2013, comencé mi doctorado en este tema debido a que planteaba grandes desafíos y una temática muy interesante. El título de mi tesis de doctorado es "PREPARACIÓN, SIMULACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES NANOESTRUCTURADOS PARA ELECTRODOS DE CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO DE TEMPERATURA INTERMEDIA (IT-SOFC)" el cual debería culminar en 2017.

Esta tesis ha dado lugar a publicaciones internacionales muy importantes como la publicada en Journal of Power Sources en 2015 (Impact Factor 2016: 6.333) "Effect of the symmetric cell preparation temperature on the activity of Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-d} as cathode for intermediate temperature Solid Oxide Fuel Cells" que ya cuenta con 7 citaciones y Journal of Power Sources en 2016 "Effect of Cu doping on Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{1-x}Cu_xO_{3-d} perovskites for solid oxide fuel cells: A first-principles study" aún sin citas.

Además he colaborado con otros investigadores como puede verse en mis trabajos haciendo la caracterización mediante rayos X/Espectroscopía de Impedancia (EIS) o cálculos de química teórica para el estudio de materiales de Baterías de Litio, Aleaciones para almacenamiento de H₂, Cerámicos Magnéticos, Polímeros Conductores, Semiconductores MOS, Catalizadores de Syngas y Vidrios Cerámicos para detectores de radiación. Este trabajo sinérgico con otros colaboradores me ha enriquecido como investigador.

En esta última etapa también he comenzado a trabajar en el Laboratorio Tecnológico del Uruguay (LATU) en la gerencia de I+D+i como Ingeniero en el escalado de procesos para el desarrollo de productos alimentarios. Esta experiencia me ha permitido comenzar a desarrollarme en el área de alimentos.

En cuanto a mi productividad científica a la fecha cuento con 9 artículos científicos completos y 26 trabajos presentados en eventos nacionales/internacionales.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Experimental and theoretical Raman study on the structure and microstructure of Li_{0.30}La_{0.57}TiO₃ electrolyte prepared by the sol-gel method in acetic medium (Completo, 2016)

MARIANO ROMERO , R. FACCIO , Santiago Vázquez , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Ceramics International, v.: 42 2016

Palabras clave: Li battery Raman characterization

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Ciencia de materiales

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 02728842

DOI: [10.1016/j.ceramint.2016.06.192](https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.06.192)

In this report, we prepare LLTO ceramics by the sol-gel method in acetic medium. Raman spectroscopy showed the formation of lanthanum and titanium acetates precursors, which after calcination, lead to formation of the LLTO nanoparticles. Raman spectra were scanned directly over the LLTO pellets and the disappearance of impurities was observed during the microstructure evolution with increasing sintering temperature. X-ray diffraction characterization, including full pattern profile fitting refinements, showed no drastic changes in the unit cell parameters of the LLTO perovskite, but a large increase in the crystallite size domain was observed with increasing sintering temperature. Additionally, an interesting structural phase transition for the Li_{0.30}La_{0.57}TiO₃ perovskite structure was observed, from tetragonal P4/mmm to distorted-cubic Pm-3m spacegroup, for the highest sintering temperature (T_s=1300 °C). Experimental and theoretical simulations of Raman spectroscopy confirmed the formation of a distorted-cubic phase and confocal Raman spectroscopy showed the presence of traces of impurities at the grain boundary region. In spite of the low total lithium conductivity observed, the electrochemical impedance spectroscopy analysis showed a remarkable increase in the lithium bulk conductivity for T_s=1300 °C. This fact could be attributed to the structural phase transition from tetragonal to the cubic crystal system.

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Effect of Cu doping on Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{1-x}Cu_xO_{3-d} perovskites for solid oxide fuel cells: A first-principles study (Completo, 2016)

Santiago Vázquez , LEOPOLDO SUESCUN , R. FACCIO

Journal of Power Sources, v.: 311 p.:13 - 20, 2016

Palabras clave: DFT

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03787753

DOI: [10.1016/j.jpowsour.2016.02.028](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.02.028)

Nowadays a rational design of solid oxide fuel cells (SOFCs) cathodes is possible thanks to first-principles calculations based on density functional theory (DFT). We study the effect of Cu-doping in the bulk properties for the perovskite $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Fe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_{3-d}$ (with $x = 0, 0.25$ and 0.50) and correlate the results with previous experimental characterization. Bulk properties such as geometric structure, charge analysis, thermodynamic stability, vacancy formation energy, oxygen diffusion and electronic structure were studied in detail to provide an explanation of the oxygen reduction reaction (ORR) activity enhancement with Cu-doping. The results obtained here, using GGA+U, demonstrate the first-principles approach gives useful information that allows the prediction and explanation of experimental characterizations.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Enhancement of lithium conductivity and evidence of lithium dissociation for LLTO-PMMA nanocomposite electrolyte (Completo, 2016)

MARIANO ROMERO , R. FACCIO , Santiago Vázquez , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Materials Letters, v.: 172 p.:1 - 5, 2016

Palabras clave: Li battery

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 0167577X

DOI: [10.1016/j.matlet.2016.02.128](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.02.128)

<http://www.sciencedirect.com/>

We report the effect of $\text{La}_{0.57}\text{Li}_{0.3}\text{TiO}_3$ (LLTO) nanoparticles addition, with different crystallite size, on the lithium conductivity of LLTO-PMMA nanocomposites. X-ray powder diffraction and differential scanning calorimetry analyses showed a moderate increase of the disorder on the polymer chains with the addition of LLTO nanoparticles. Confocal Raman spectroscopy analysis evidenced lithium nitrate dissociation for both LLTO-loaded and unloaded polymer. Additionally, this technique also revealed that the free nitrate anions are mostly located in the proximity of LLTO nanoparticles interface, thus evidencing its participation in the lithium dissociation on these nanocomposites. An enhancement in the lithium conductivity in more than one order of magnitude was observed for all nanocomposites, in respect to LLTO-unloaded polymer, showing a maximum lithium conductivity of total 1.13×10^{-4} S/cm at room temperature, for a 50 nm LLTO crystallite mean size addition.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Synthesis and preliminary study of $\text{La}_4\text{BaCu}_5\text{O}_{13+d}$ and $\text{La}_{6.4}\text{Sr}_{1.6}\text{Cu}_8\text{O}_{20+d}$ ordered perovskites as SOFC/PCFC electrode materials (Completo, 2016)

MARIO MACIAS , MÓNICA V. SANDOVAL , NELSON G. MARTINEZ , Santiago Vázquez ,

LEOPOLDO SUESCUN , PASCAL ROUSSEL , KONRAD ŚWIERCZEK , GILLES H. GAUTHIER

Solid State Ionics, 2016

Palabras clave: SOFC

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 01672738

DOI: [10.1016/j.ssi.2016.02.010](https://doi.org/10.1016/j.ssi.2016.02.010)

<http://www.sciencedirect.com/>

$\text{La}_4\text{BaCu}_5\text{O}_{13+d}$ (LBCu) and $\text{La}_{6.4}\text{Sr}_{1.6}\text{Cu}_8\text{O}_{20+d}$ (LSCu) oxygen deficient perovskites, synthesized by a Pechini-type gel combustion method, have been investigated as potential cathode materials for IT-SOFC applications. The thermal stability and chemical compatibility with SOFC/PCFC electrolyte materials are examined using X-ray diffraction technique. For both compounds, no structural change is detected in air until 900 °C. The evolution of cell parameters with temperature shows thermal expansion coefficients (TEC) of 17.3×10^{-6} K⁻¹ and 12.1×10^{-6} K⁻¹ for LBCu and LSCu, respectively. For LBCu, the formation of oxygen vacancies is evidenced between 700 and 900 °C in air. Chemical reactivity tests with several SOFC electrolyte materials reveal a high reactivity of both cuprates with YSZ, GDC and, to a lesser extent, with LSGM. On the

other hand, and contrary to what occurs for LSCu, LBCu presents an excellent chemical compatibility with doped barium cerate and zirconate, opening further perspectives for this material as possible SOFC or PCFC cathode. LBCu material presents a quite high electrical conductivity with metallic-type behavior

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Synthesis and characterization of La_{0.6}Sr_{0.4}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-d} oxide as cathode for Intermediate Temperature Solid Oxide Fuel Cells (Completo, 2015)

Santiago Vázquez, SEBASTIÁN DAVYT, J. F. BASBUS, ANALÍA L. SOLDATI, ALEJANDRO AMAYA, ADRIANA SERQUIS, R. FACCIO, LEOPOLDO SUESCUN

Journal of Solid State Chemistry, v.: 228 p.:205 - 213, 2015

Palabras clave: IT-SOFC Cathode Perovskite Gel combustion

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Difracción de Rayos X

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00224596

DOI: [10.1016/j.jssc.2015.04.044](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2015.04.044)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2015.04.044>

Nanocrystalline La_{0.6}Sr_{0.4}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O₃ (LSFCu) material was synthesized by combustion method using EDTA as fuel/chelating agent and NH₄NO₃ as combustion promoter. Structural characterization using thermogravimetry data allowed to determine a reversible phase transition at 425°C from a low temperature R-3c phase to a high temperature Pm-3m phase and to calculate the thermal expansion coefficient (TEC) of both phases. Important characteristics for cathode application as electronic conductivity and chemical compatibility with Ce_{0.9}Gd_{0.1}O₂ (CGO) electrolyte were evaluated. LSFCu presented a p-type conductor behavior with maximum conductivity of 135 S cm⁻¹ at 275 °C and showed a good stability with CGO electrolyte at high temperatures. This work confirmed that as prepared LSFCu has excellent microstructural characteristics and an electrical conductivity between 100 and 60 S cm⁻¹ in the 500-700 °C range which is sufficiently high to work as intermediate temperature Solid Oxide Fuel Cells (IT-SOFCs) cathode. However a change in the thermal expansion coefficient consistent with a small oxygen loss process may affect the electrode-electrolyte interface during fabrication and operation of a SOFC.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

A Study on the Polymer Precursor Formation and Microstructure Evolution of Square-Shaped (La_{0.5}Ba_{0.5})(Mn_{0.5}Fe_{0.5})O₃ Ceramic Nanoparticles (Completo, 2015)

MARIANO ROMERO, HELENA PARDO, R. FACCIO, LEOPOLDO SUESCUN, Santiago Vázquez, I. LABORDA, L. FERNANDEZ, ALVARO ACOSTA, JORGE CASTIGLIONI, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Journal of Ceramic Science and Technology, v.: 6 p.:1 - 8, 2015

Palabras clave: Ceramics Sol-gel

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 21909385

DOI: [10.4416/JCST2015-00005](https://doi.org/10.4416/JCST2015-00005)

<http://www.ceramic-science.com>

The polymer precursor formation and the growth mechanism of (La_{0.5}Ba_{0.5})(Mn_{0.5}Fe_{0.5})O₃ ceramic nanoparticles have been studied. First, we focused on the influence of isolated metals (La, Ba, Mn, Fe) on the polymer precursor formation by means of Raman, FT-IR, scanning electron microscopy and differential scanning calorimetry, showing that the presence of metal ions, especially iron, increases the oxidation rate of the polymer precursor, while the presence of barium leads to a higher degree of polymerization, preventing partial oxidation of the polymer at low temperatures and allowing the presence of nitrates at the combustion stage. Nevertheless, when all metals are present, the polymer precursor showed a largely homogeneous microstructure with a global average influence from all cations. Finally, we studied the microstructure evolution of nanoparticles obtained after calcination above 700 °C. SAXS and TEM analysis suggests that the formation of square-shaped nanoparticles below 900 °C and coalescence leads to the formation of larger-sized and round-shaped nanoparticles at 900 °C.

Scopus®

Effect of the symmetric cell preparation temperature on the activity of Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-d} as cathode for intermediate temperature Solid Oxide Fuel Cells (Completo, 2015)

Santiago Vázquez, J. F. BASBUS, ANALÍA L. SOLDATI, F. NAPOLITANO, ADRIANA SERQUIS, LEOPOLDO SUESCUN

Journal of Power Sources, v.: 274 p.:318 - 323, 2015

Palabras clave: SOFC EIS Co-free cathodes

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Materiales para fuentes de energía

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03787753

DOI: [10.1016/j.jpowsour.2014.10.064](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.10.064)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.10.064>

In this work we study the electrochemical performance of Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O₃ (BSFCu) as cathode for Intermediate Temperature Solid Oxide Fuel Cells (IT-SOFC) with Ce_{0.9}Gd_{0.1}O₂ (CGO) electrolyte and the effect of the symmetric cell preparation temperature on the oxygen reduction reaction (ORR) activity. Symmetrical cells with the configuration BSFCu/CGO/BSFCu were prepared at 900°C, 950°C and 1000°C to perform the electrochemical characterization in the 500-700°C temperature range. The resultant area specific resistance (ASR) of the cells with different preparation temperatures follows the tendency: ASR_{900°C} < ASR_{950°C} < ASR_{1000°C}. The symmetric cell constructed at 900°C shows ASR values of 0.18, 0.078 and 0.035 ohm.cm² at 600, 650 and 700 °C respectively, which demonstrates superior electrochemical activities than previous reports. Additional, x-ray diffraction (XRD), scanning and transmission electron microscopies (SEM and TEM) techniques were used to characterize the microstructure of the original and fired BSFCu materials and correlate it with the cell preparation temperature.

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, Santiago Vázquez, R.KEUCHKERIAN, ANDRÉS CÁRDENAS,

A.OLIVERA, R. FACCIO, J. CASTIGLIONI, J.F. SCHNEIDER, L. FORNARO

Journal of Non-Crystalline Solids, v.: 427 p.:191 - 198, 2015

Palabras clave: Borates Thermally stimulated luminescence Glass ceramics

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00223093

DOI: [10.1016/j.jnoncrysol.2015.07.045](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2015.07.045)

<http://www.sciencedirect.com/>

Borate glasses with the composition MO·2B₂O₃ (M: Pb, Sr and Ba) and N₂O·2B₂O₃ (N: Li and Na) were prepared. Glass-ceramics of the same composition were obtained by heat treating glass powder. The structure of the glasses, was studied by FTIR and ¹¹B NMR resulted in a similar structure (having BO₃ and BO₄ species). The PbO·2B₂O₃ sample shows the lowest fraction of four coordinated boron, N₄, of the set. Glass crystallization was analyzed by thermal analysis, using the Kissinger method. The evaluated activation energy shows that the BaO·2B₂O₃ sample presents the highest value; meanwhile Li₂O·2B₂O₃ shows the lowest one. Thermally stimulated luminescence was measured in glasses and glass-ceramics using a ⁹⁰Sr radiation source. In most cases, glass-ceramics present a higher sensitivity than glasses. Defects present in glasses are increased by the crystallization to improve the TL response of these materials. When we compare the response, as the area under the curve, (which is related to the absorbed dose) bariumborate glass-ceramics present the best response compared to the other studied borates.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Modelado de una Celda de Combustible de Oxido Sólido (SOFC) para uso residencial (Completo, 2014)

Santiago Vázquez, V. DÍAZ, M. CORENGIA, LEOPOLDO SUESCUN

Ingeniería Química, v.: 44 p.:74 - 79, 2014

Palabras clave: Ingeniería Química SOFCs

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Modelado de

Procesos electroquímicos

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Uruguay

ISSN: 07974930

<http://www.aiqu.org.uy>

Este trabajo modela y calcula la operación de una Celda de Combustible de Óxido Sólido (SOFC) con una potencia de 3.7 kW para uso residencial. Se utilizó gas licuado de petróleo (GLP) y gas natural (GN) como combustibles para alimentar la celda. Los resultados predicen eficiencias de 59-68.6% entre 700 y 800°C, las cuales duplican valores alcanzados en centrales térmicas. El costo de

generación del kWh para el gas natural mostró ser bastante menor a las tarifas vigentes en nuestro país, lo que vuelve a las SOFC como una alternativa atractiva para el futuro.

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Estudio Estructural y Electrónico en Fases de Laves Hidrogenadas (2016)

Resumen

ERIKA TÉLIZ , Santiago Vázquez , R. FACCIO , FERNANDO ZINOLA , V. DÍAZ

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE2016)

Ciudad: Cariari, Costa Rica

Año del evento: 2016

Palabras clave: Energía Almacenamiento de hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<https://www.ucr.ac.cr/actividades/2016/03/14/xxii-congreso-sociedad-iberoamericana-de-electroquimica>

Estudio del efecto del Al en aleaciones tipo AB₂ de base Zr (2016)

Resumen

ERIKA TÉLIZ , R. FACCIO , Santiago Vázquez , CAMILA YATTAH , FERNANDO ZINOLA , V. DÍAZ

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE2016)

Ciudad: Cariari, Costa Rica

Año del evento: 2016

Palabras clave: Energía Almacenamiento de hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<https://www.ucr.ac.cr/actividades/2016/03/14/xxii-congreso-sociedad-iberoamericana-de-electroquimica>

Efecto del aluminio y molibdeno en el almacenamiento electroquímico de hidrógeno en aleaciones LaNi₅ (2016)

Resumen

ERIKA TÉLIZ , JOAQUÍN DIEZ , R. FACCIO , Santiago Vázquez , V. DÍAZ , FERNANDO ZINOLA

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE2016)

Ciudad: Cariari, Costa Rica

Año del evento: 2016

Palabras clave: Energía Almacenamiento de hidrógeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Nanotecnología y ciencia de materiales

Medio de divulgación: Otros

<https://www.ucr.ac.cr/actividades/2016/03/14/xxii-congreso-sociedad-iberoamericana-de-electroquimica>

First principles study of MoS₂: electronic structure and phonons (2016)

Resumen

Santiago Vázquez , R. FACCIO , BENJAMÍN MONTENEGRO

Evento: Internacional

Descripción: 42th Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: DFT Ab initio calculations Química teórica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Química

teórica

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Diseño de materiales

Medio de divulgación: Papel

<http://quitel2016.org.uy/>

Since the discovery of the exceptional properties of graphene, 2D layer materials such as the transition metal dichalcogenides (TMDs) have gained renewed interest [1]. The MoS₂ is one of such TMDs and the layers of MoS₂ are made up of hexagons with Mo and two S atoms in alternated corners. The figure shows the MoS₂ in the bulk form with alternated layers of MoS₂. The thicknesses of the layers are 3.17 Å and the space between adjacent layers is 2.98 Å which show this is bonded by van der Waals forces. An important property of the MoS₂ for solar cells and optical devices is the band gap (E_g). In the case of the MoS₂ there is a transition from an indirect band gap (E_g=1.29 eV) to a direct band gap (E_g=1.90 eV) when the thickness of the material goes from bulk to single-layer [2]. In this work we study by first principles the MoS₂ electronic structure and phonons properties by means of Density Functional Theory (DFT) as is implemented in the VASP code. The electronic structure of MoS₂ in their bulk, single layer, double layer, triple layer and four layer forms were calculated to evaluate the evolution of band gaps. Phonons calculations were performed to simulate the Raman spectra and thermal properties of MoS₂. References [1] Xu M., Liang T., Shi M. and Chen H.; Chem. Rev., 2013, 113 (5), pp 3766-3798. [2] Fortin E. and Sears W. M.; J. Phys. Chem. Solids 1982, 43, pp 881.

Estudio Estructural de Cátodos para IT-SOFCs de Tipo Perovskita Preparados por Combustión de Gel Asistida usando Termodifracción. (2016)

Resumen

LEOPOLDO SUESCUN , Santiago Vázquez , SEBASTIÁN DAVYT , MARIO MACIAS , JOAQUÍN GRASSI , RODOLFO QUEIROLO , LEANDRO CANTERA , NICOLÁS ESTEFAN

Evento: Nacional

Descripción: VIII Congreso Nacional de Cristalografía

Ciudad: Yucatán, México

Año del evento: 2016

Palabras clave: SOFCs

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<http://www.smcr.fisica.unam.mx/>

En este trabajo se presentan resultados de generalizar el método de síntesis de óxidos cerámicos de tipo perovskita por Combustión de Gel Asistida para obtener nanopartículas de perovskitas a temperaturas más bajas que las reportadas por métodos convencionales como forma de regular la microestructura del material. Los materiales obtenidos fueron estudiados por termodifracción entre temperatura ambiente y 900 °C para determinar su coeficiente de expansión térmica y la simetría de la red, y la existencia o no de transiciones de fase que produzcan cambios abruptos en las propiedades físicas y mecánicas que puedan afectar el trabajo de las IT-SOFCs. Se presentan los resultados principales de estudios estructurales realizados sobre muestras BSFCu, LSFcu, LSCM e YBCO que se presentan como promisorios cátodos de IT-SOFCs en función de sus propiedades electroquímicas ya evaluadas.

Producción de hidrógeno mediante reformado autotérmico de glicerina cruda sobre catalizadores Ni-La-Me (Me: Ce y/o Zr) (2016)

Resumen

SANTIAGO VEIGA , Santiago Vázquez , R. FACCIÓ , DARÍO SEGOBIA , HERNÁN DUARTE , CARLOS APESTEGUÍA , JUAN BUSSI

Evento: Internacional

Descripción: Congreso Iberoamericano de Catálisis CICat 2016

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Palabras clave: Catálisis

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Catálisis

Medio de divulgación: Otros

<http://www.cicat2016.org/>

El reformado autotérmico de glicerina cruda, fue evaluado utilizando catalizadores Ni-La-Me (Me: Ce y/o Zr), sintetizados por el método del precursor polimérico, conteniendo 12% p/p de Ni y calcinados a 850°C. Estos fueron caracterizados mediante DRX, TPR, ICP, quimisorción de H₂ y fueron ensayados a 650°C utilizando una mezcla glicerina cruda/H₂O (30% p/p en glicerina) y relación molar O₂/glicerina cruda de 0,5. Todos los catalizadores reducidos presentan una fase de

Ni metálico y un óxido mixto de estequiometría (Ce_{0,56}La_{0,44})O_{1,78}. Un mayor contenido de Zr provoca una disminución de la reducibilidad del catalizador. El mayor rendimiento a H₂ y la menor deposición de carbón la presenta el catalizador que contiene Ce y Zr. Esto es atribuido a la mayor capacidad de almacenar oxígeno produciendo especies móviles de este elemento que estarían relacionados con mecanismos que actúan en la remoción de residuos carbonosos sobre el catalizador. Finalmente se verificó que la deposición de carbón y la acumulación de las cenizas presentes en la glicerina cruda disminuyen la actividad del catalizador pero éste puede retomar su actividad inicial mediante tratamientos de oxidación y lavado con agua líquida.

First principles study of MoS₂ electronic structure (2015)

Resumen

Santiago Vázquez , R. FACCIO , BENJAMÍN MONTENEGRO

Evento: Internacional

Descripción: VIth Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations

Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 2015

Palabras clave: DFT Ab initio calculations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Química teórica

Medio de divulgación: Papel

Since the discovery of the exceptional properties of graphene, 2D layer materials such as the transition metal dichalcogenides (TMDs) have gained renewed interest [1]. The MoS₂ is one of such TMDs and the layers of MoS₂ are made up of hexagons with Mo and two S atoms in alternated corners. The figure shows the MoS₂ in the bulk form with alternated layers of MoS₂. The thicknesses of the layers are 3.17 Å and the space between adjacent layers is 2.98 Å which show this is bonded by van der Waals forces. An important property of the MoS₂ for solar cells and optical devices is the band gap (E_g). In the case of the MoS₂ there is a transition from an indirect band gap (E_g=1.29 eV) to a direct band gap (E_g=1.90 eV) when the thickness of the material goes from bulk to single-layer [2]. In this work we study by first principles the MoS₂ electronic structure and phonon properties by means of Density Functional Theory (DFT) as is implemented in the VASP code. The electronic structure of MoS₂ in their bulk, single layer, double layer, triple layer and four layer forms were calculated to evaluate the evolution of band gaps. Phonons calculations were performed to simulate the Raman spectra and thermal properties of MoS₂. References [1] Xu M., Liang T., Shi M. and Chen H.; Chem. Rev., 2013, 113 (5), pp 3766-3798. [2] Fortin E. and Sears W. M.; J. Phys. Chem. Solids 1982, 43, pp 881.

Estudio ab initio de formación de vacancias y barreras de migración de oxígeno en los materiales Ba_{0.55}Sr_{0.5}Fe_{1-x}Cu_xO_{3-d} (2015)

Resumen

Santiago Vázquez , R. FACCIO , LEOPOLDO SUESCUN

Evento: Nacional

Descripción: 4to Encuentro Nacional de Ciencias Químicas

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: DFT Ab initio calculations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Química teórica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy/>

Preparación y caracterización de nanomateriales basados en LiFePO₄ como cátodos para baterías de ión-litio (2015)

Resumen

DOMINIQUE MOMBRÚ , Santiago Vázquez , FERNANDO PIGNANELLI , MARIANO ROMERO , R. FACCIO , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Evento: Nacional

Descripción: 4to Encuentro Nacional de Ciencias Químicas

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: Li-battery

Areas de conocimiento:

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

Síntesis y caracterización de $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Fe}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}\text{O}_{3-d}$ como cátodo para Celdas de Combustible de Oxido Sólido de Temperatura Intermedia (IT-SOFC) (2014)

Resumen

Santiago Vázquez, SEBASTIÁN DAVYT, JUAN F. BASBUS, ANALÍA L. SOLDATI, ADRIANA SERQUIS, R. FACCIO, LEOPOLDO SUESCUN

Evento: Nacional

Descripción: 1er Encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía (RUCr)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2014

Palabras clave: Cátodos IT-SOFCs

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/encuentroreduc/>

Las Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFCs) son dispositivos electroquímicos considerados como unos de los más importantes candidatos para generación de potencia desde grandes centrales estacionarias a formas pequeñas y portables para generación distribuida [1]. Hoy en día existe un gran interés en el desarrollo de Celdas de Combustible de Óxido Sólido de Temperatura Intermedia (IT-SOFCs) trabajando en el rango de temperaturas entre 500-700°C [2]. Uno de los tópicos de investigación es desarrollar cátodos altamente activos y estables por largos tiempos para IT-SOFCs. A su vez reducir la temperatura de operación reduce la cinética de los electrodos e incrementa la resistencia de transferencia de carga, en particular en el lado del cátodo. En consecuencia se ha realizado un gran esfuerzo en mejorar la performance del cátodo utilizando diferentes rutas de síntesis y composiciones para obtener materiales porosos, con tamaños de partícula pequeños y alta pureza [3-5]. REFERENCIAS [1] Arnab Choudhury, H. Chandra, and A. Arora, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 20 (2013) 430-442. [2] Brian C. H. Steele and Angelika Heinzl, Nature, 414 (2001), 345-352. [3] Zongping Shao and Sossina M. Haile, Nature, 431 (2004), 170-173. [4] Rares Scurtu and Simona Somacescu, Journal of Solid State Chemistry, 210 (2014) 53-59. [5] Analía L. Soldati and Laura Baqué, Journal of Solid State Chemistry, 198 (2013) 253261.

Preparación, caracterización estructural y eléctrica de compuestos de $\text{Li}_x\text{RE}_4\text{Ti}_5\text{O}_{24}$ (RE: La, Pr y Nd): Nuevos electrolitos para sistemas de almacenamiento de energía (2014)

Resumen

SEBASTIÁN DAVYT, LETICIA DONATTI, Santiago Vázquez, ÁLVARO W. MOMBRÚ, R. FACCIO

Evento: Nacional

Descripción: 1er Encuentro de la Red Uruguaya de Cristalografía

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2014

Palabras clave: DRX Li battery

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<https://sites.google.com/site/encuentroreduc/>

Los materiales cerámicos con potencial aplicación en supercondensadores son un área de interés tecnológico para el almacenamiento de energía eficiente. En los últimos años se les está dedicando muchos recursos debido su rápida carga y descarga, alta densidad de potencia y tiempos de ciclo de vida largos debido a su gran estabilidad estructural 1. En este proyecto se plantea la obtención de nuevos materiales cerámicos conductores de Li^+ y nanoestructurados, para su eventual uso en tecnologías para el almacenamiento de energía. El interés en estos materiales radica principalmente en su aplicación como electrolitos en baterías recargables de Li^+ ya que presentan el potencial de una alta eficiencia de almacenamiento de energía, así como buena estabilidad mecánica. Éstos materiales deben presentar alta conductividad a temperatura ambiente y buena estabilidad mecánica. Por ejemplo, el sistema $\text{La}_{0.51}\text{Li}_{0.34}\text{TiO}_3$ presenta una conductividad iónica importante 2.

Nuevos materiales de la serie $\text{La}_4\text{BaCu}_5-x\text{M}_x\text{O}_{13+d}$ con $\text{M} = \text{Fe}$ y Ni . Síntesis y caracterización estructural. (2013)

Resumen expandido

Santiago Vázquez, LEOPOLDO SUESCUN, MARIANO ROMERO, SEBASTIÁN DAVYT

Evento: Internacional

Descripción: I Reunión Latinoamericana de Cristalografía y IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Córdoba, Argentina

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Nuevos materiales de la serie $\text{La}_4\text{BaCu}_5\text{-xMxO}_{13+\delta}$ con M= Fe y Ni. Síntesis y caracterización estructural.

Palabras clave: Cristalografía

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://www.cristalografia.com.ar/>

Los compuestos de la serie $\text{La}_4\text{BaCu}_5\text{-xMxO}_{13+\delta}$ (con M= Fe y Ni) se sintetizaron por el método de combustión de gel asistida en un solo paso de calentamiento a 950°C por 5 horas. La caracterización estructural de las fases se realizó mediante el método de Rietveld a partir de medidas de difracción de rayos X (DRX) de polvo a temperatura ambiente. Se caracterizó la transición de la fase con vacancias de oxígeno ordenadas rica en Cu a una fase con vacancias desordenadas al aumentar la proporción de Fe y Ni. Se extendieron los límites de solución sólida reportados para el Ni para esta serie y se caracterizó la transición estructural orden-desorden de vacancias de oxígeno al aumentar x

Estabilidad Química entre pares cátodo-electrolito para IT-SOFCs (2013)

Resumen

SEBASTIÁN DAVYT , LEOPOLDO SUESCUN , Santiago Vázquez

Evento: Internacional

Descripción: I Reunión Latinoamericana de Cristalografía y IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Córdoba

Año del evento: 2013

Palabras clave: SOFC DRX

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

<http://www.cristalografia.com.ar/>

Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-δ} como cátodo para IT-SOFC (2013)

Resumen

Santiago Vázquez , J. F. BASBUS , MARIANO ROMERO , F. NAPOLITANO , ADRIANA SERQUIS , R. FACCIO , LEOPOLDO SUESCUN

Evento: Nacional

Descripción: 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (ENACUI)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Palabras clave: SOFC DRX DFT Combustión de Gel

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Cálculos de Química Cuántica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

DFT study of defects and electronic structure in Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-d} (2013)

Resumen

Santiago Vázquez , LEOPOLDO SUESCUN , R. FACCIO

Evento: Nacional

Descripción: V Workshop on novel methods for electronic structure calculations

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Palabras clave: DFT Electronic structure

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Cálculos de Química Cuántica

Medio de divulgación: Papel

Metal oxides with cubic (or pseudo-cubic) perovskite structure ABO_3 constitute a class of interesting materials with very attractive properties for technological application. The perovskite family includes insulators, semiconductors, metals, piezoelectrics, ferroelectrics, ferromagnets, superconductors and catalysts (1). In this work we study the $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$ compound, which presents a perovskite structure and a cubic lattice with oxygen vacancies ($\delta > 0$). This compound is a candidate for SOFC (Solid Oxide Fuel Cells) cathode material and its role is to promote the oxygen incorporation in the cell through the oxygen reduction reaction (ORR) $O_2(gas) + 4e^- \rightarrow 2O^{2-}(bulk)$. For this application the compound must show mixed ionic-electronic conductivity (MIEM) and catalytic activity towards the ORR. In this work the generation of defects, cation exchange and electronic structure of $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$ were studied using first principles Density Functional Theory (DFT) calculations using the VASP code. Lattice defects were simulated using supercells through expanding the ABO_3 primitive unit cell by $2 \times 2 \times 2$ (40 atoms). The results include formation energy, defect formation energy and electronic properties, and are compared with the $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ compound. This is a typical SOFC cathode material with high performance but low stability. DFT results from this cobalt-based perovskite has been reported in literature (2-4) and were re-calculated by us to compare with $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$. REFERENCES 1. T. Wolfram and S. Ellialtioglu, Electronic and optical properties of d-band perovskites 2006. ISBN-13 978-0-511-34949-2. 2. M.M. Kuklja, et al., Journal of Physical Chemistry C 2012, (116) 18605-18611. 3. C. Wessel, et al., Journal of Membrane Science 2011, (366) 9296. 4. S. Ganopadhyay, et al., Solid State Ionics 2010, (181) 10671073.

Termodifracción de cerámicos $La_4BaCu_{5-x}M_xO_{13+d}$ y $La_{0.8}Ba_{0.2}Cu_{1-x}M_xO_{3-d}$ M=Fe, Co, Ni y Mn, potenciales cátodos para IT-SOFCs (2013)

Resumen

LEOPOLDO SUESCUN, Santiago Vázquez, SEBASTIÁN DAVYT, MARIO MACIAS, G.H. GAUTHIER

Evento: Internacional

Descripción: I Reunión Latinoamericana de Cristalografía y IX Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Córdoba

Año del evento: 2013

Palabras clave: SOFC DRX

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

<http://www.cristalografia.com.ar/>

$Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$ como cátodo para IT-SOFC (2013)

Resumen

Santiago Vázquez, J. F. BASBUS, MARIANO ROMERO, F. NAPOLITANO, ADRIANA SERQUIS, R. FACCIO, LEOPOLDO SUESCUN

Evento: Internacional

Descripción: Congreso Latinoamericano de Cristalografía

Ciudad: Córdoba

Año del evento: 2013

Palabras clave: SOFC, Cátodos, EIS, DRX, DFT

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

Síntesis y caracterización de materiales para electrolitos de celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) basados en cerio (IV) (2012)

Resumen

G. VITALE, Santiago Vázquez, LEOPOLDO SUESCUN

Evento: Nacional

Descripción: Programa Acortando Distancias

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2012

Palabras clave: SOFC DRX

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

Synthesis and Characterization of the series Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}M_{0.2}O_{3-δ} (with M = Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Al) (2012)

Resumen

Santiago Vázquez, MARIANO ROMERO, LEOPOLDO SUESCUN, SEBASTIÁN DAVYT

Evento: Internacional

Descripción: International School on Fundamental Crystallography

Ciudad: Uberlandia, Brasil

Año del evento: 2012

Palabras clave: Cristalografía SOFC

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

Nuevos materiales de la serie La₄BaCu_{5-x}M_xO_{3-δ} (con M=Fe, Ni). Síntesis y caracterización estructural (2012)

Resumen

Santiago Vázquez, MARIANO ROMERO, LEOPOLDO SUESCUN, SEBASTIÁN DAVYT

Evento: Internacional

Descripción: VIII Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía

Ciudad: Santa Fe, Argentina

Año del evento: 2012

Palabras clave: Cristalografía SOFC

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería de Procesos Químicos / Celdas de Combustible de Óxido Sólido

Medio de divulgación: Papel

New materials in the series La₄BaCu_{5-x}M_xO_{3+d} (M=Mn, Fe, Co, Ni). Synthesis and structural characterization (2012)

Resumen

Santiago Vázquez, LEOPOLDO SUESCUN, SEBASTIÁN DAVYT, MARIO MACIAS, G.H. GAUTHIER

Evento: Internacional

Descripción: SARXS2012

Ciudad: Santa Marta, Colombia

Año del evento: 2012

Palabras clave: SOFC

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

Síntesis, caracterización estructural y composicional de PBMFO_{5.5+d} con d=0 y 0.25 (2011)

Resumen

MARIANO ROMERO, Santiago Vázquez, M. IRAZOQUI, S. CORA, I. LABORDA, L. FERNANDEZ, JORGE CASTIGLIONI, LEOPOLDO SUESCUN, R. FACCIO, HELENA PARDO, ÁLVARO W. MOMBRÚ

Evento: Internacional

Descripción: II Reunión Conjunta de la Sociedad Uruguaya de Física y Asociación de Física Argentina (AFA-SUF)

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2011

Palabras clave: Materiales Cerámicos

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Preliminary studies on the synthesis of LBMFO5.5 manganite by solid state and sol-gel method (2011)

Resumen

MARIANO ROMERO , Santiago Vázquez , M. IRAZOQUI , S. CORA , I. LABORDA , L. FERNANDEZ , JORGE CASTIGLIONI , LEOPOLDO SUESCUN , R. FACCIO , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Evento: Internacional

Descripción: 5ª ESCUELA DE SÍNTESIS DE MATERIALES: PROCESOS SOL-GEL

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 2011

Palabras clave: Materiales Cerámicos

Areas de conocimiento:

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

Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

Primeros pasos en el diseño, síntesis y caracterización de óxidos de tipo perovskita para cátodos de Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFC) (2011)

Resumen

Santiago Vázquez , MARIANO ROMERO , LEOPOLDO SUESCUN , HELENA PARDO , JORGE CASTIGLIONI

Evento: Internacional

Descripción: VII Reunión de la Asociación Argentina de Cristalografía (AACr)

Ciudad: San Carlos de Bariloche

Año del evento: 2011

Palabras clave: SOFC Materiales de cátodo

Areas de conocimiento:

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

Cristalografía

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Química del Estado Sólido

Medio de divulgación: Papel

Experimental and theoretical study of structural and magnetic properties of PrBaMnFeO5.5-d with d=0 and 0.25 (2011)

Resumen

MARIANO ROMERO , Santiago Vázquez , M. IRAZOQUI , S. CORA , I. LABORDA , L. FERNANDEZ , JORGE CASTIGLIONI , LEOPOLDO SUESCUN , N. CASTAÑ-PASTOR , R. FACCIO , HELENA PARDO , ÁLVARO W. MOMBRÚ

Evento: Internacional

Descripción: 2nd EULASUR Summer School

Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 2011

Palabras clave: Materiales Cerámicos

Areas de conocimiento:

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

Cristalografía

Medio de divulgación: Papel

Síntesis y caracterización de materiales para cátodos de SOFC (2011)

Resumen

Santiago Vázquez , MARIANO ROMERO , LEOPOLDO SUESCUN , HELENA PARDO , JORGE CASTIGLIONI

Evento: Nacional

Descripción: Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (ENACQUI)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Palabras clave: Materiales para catodos SOFC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Química del Estado Sólido

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Beca de Maestría de la ANII (2014)

(Nacional)
Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII)
Beca de maestría por un año para desarrollar mis estudios de posgrado.

Beca para apoyo de estudiantes de grado (2013)

(Nacional)
Espacio Interdisciplinario - Universidad de la República
Beca para ampliar la investigación en nuevos materiales para utilizarse en Celdas de Combustible de Óxido Sólido (SOFCs).

Beca de Iniciación a la Investigación (2011)

(Nacional)
Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII)
La beca consiste en ayuda económica para financiar horas de trabajo en investigación. La investigación se basa en la síntesis de nuevos materiales para celdas de combustible de óxido sólido.

Información adicional

[Afiliación a sociedades](#)

Socio de la Asociación Argentina de Cristalografía (AACr) desde 2011.
Socio de la Asociación Uruguaya de Carbono (AUC) desde 2013.

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	35
Artículos publicados en revistas científicas	9
Completo	9
Trabajos en eventos	26