



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1. – Datos del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

Síntesis de nanomateriales multifuncionales: Redes metal-orgánicas (MOFs) y Nano-óxidos para aplicaciones catalíticas, de adsorción y microbiológicas

- Título del Proyecto (en inglés)

Synthesis of multifunctional nanomaterials: Metal-organic frameworks (MOFs) and nano-oxides for catalytic, adsorption and microbiological applications

- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

En este Proyecto se efectuarán investigaciones en torno a la síntesis de nuevos nanomateriales con propiedades multifuncionales, conformados como cristales y películas nano-estructuradas tanto inorgánicas como híbridas orgánicas-inorgánicas, conteniendo sitios activos de metales no nobles. Los estudios, de carácter interdisciplinario, implicarán la evaluación de los materiales en diversas aplicaciones, en particular catalíticas, electrocatalíticas, de adsorción y microbiológicas. En nuestro grupo desde hace unos años llevamos adelante líneas de estudio sobre redes metal-orgánicas (MOFs) y películas de nano-óxidos, con fines aplicados. Los MOFs son sólidos con una diversidad de propiedades fisicoquímicas y posibilidades de funcionalización, que los han posicionado como uno de los materiales multifuncionales actuales más promisorios. Algo similar ocurre con películas de óxidos con cristales en el dominio nanométrico, dado que tanto la forma como el tamaño de estos óxidos tienen un gran efecto en varias propiedades, como las catalíticas o de actividad microbiológica, entre otras. La generación de nuevas tecnologías que permitan procesos más limpios y sustentables es una demanda actual de la sociedad y uno de los caminos es la optimización de las existentes y el desarrollo de nuevos materiales que conduzcan a procesos más eficientes y menos contaminantes. Esto último, implica una problemática de investigación desde la síntesis de los materiales, su modificación y, ensayo hasta la vinculación de sus propiedades con el desempeño.

- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

In this project, research will be carried out around the synthesis of new nanomaterials with multifunctional properties, shaped as crystals and nano-structured films, both inorganic and organic-inorganic hybrids, containing active sites of non-noble metals. The interdisciplinary studies will involve evaluating the materials in various applications, in particular catalytic, electrocatalytic, adsorption and microbiological. In our group we have performed studies on metal-organic networks (MOFs) and nano-oxide films, with applied purposes. MOFs are solid with a diversity of physicochemical properties and functionalization possibilities, which have positioned them as one of the most promising current multifunctional materials. Something similar occurs with oxide films with crystals in the nanometric domain, since both the shape and size of these oxides have a great effect on various properties, such as catalytic or microbiological activity, among others. The generation of new technologies that allow cleaner and more sustainable processes is a current demand of society and one of the ways is the optimization of existing ones and the development of new materials



that lead to more efficient and less polluting processes. The latter implies a research problem from the material synthesis, their modification and testing, up to the linkage of their properties with performance.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

Redes metal-orgánicas Nano-óxidos Materiales multifuncionales

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)

Metal-organic frameworks Nano-oxides Multifunctional materials

2 – Datos del Director/a del Proyecto

- Nombre y Apellido: Juan Manuel Zamaro

- Unidad Académica: Facultad de Ingeniería Química

- Teléfono oficial de contacto: +54 342 4536861

-Teléfono móvil de contacto: 155034800

-E-mail del Director/a del Proyecto: zamaro@fiq.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describe la toma de muestras / datos a realizar

El desarrollo de las actividades del proyecto, seguirá el siguiente diseño del plan de investigación:

- Síntesis de MOFs
- Síntesis de películas de óxidos nano-estructurados
- Modificación post-sintética de los MOFs y nano-óxidos
- Caracterizaciones fisicoquímicas
- Ensayos aplicados de los materiales

El desarrollo de la metodología consignada en el inciso anterior, se llevará a cabo según las siguientes técnicas:

- Síntesis de MOFs: se efectuará la síntesis de MOFs de interés Cu-MOF, Zn-MOF, Zr-MOF y Fe-MOF por síntesis solvotérmica, modificando ligandos y precursores metálicos acorde a cada MOF y se regulará la temperatura de síntesis, relaciones molares de reactivos/solvente y adición de moduladores (como acetato de sodio, ácido fórmico o surfactantes). También se efectuará la síntesis asistida por calentamiento con microondas, con un equipo con sensores infrarrojo y fibra óptica para el control de la temperatura y agitador magnético automático que permite ejecutar múltiples reacciones sintéticas en paralelo. Este tipo de síntesis brinda un calentamiento más rápido y homogéneo de la fase líquida, brindando una aceleración de la cristalización.

Síntesis de películas de óxidos nano-estructurados: se efectuará con métodos basados en oxidaciones controladas de los sustratos por tratamientos con vapores oxidantes (VO) y tratamientos térmicos en atmósfera de aire (TA), respectivamente. En el grupo logramos aplicar ambos métodos para obtener crecimientos nanoestructurados de CuOx en sustratos de cobre y ahora se extenderá hacia otras aleaciones metálicas y configuraciones (micromallas). En un caso, el sustrato, se expondrá a vapores de mezclas NH4OH y H2O2 y se analizará la proporción relativa de cada reactivo, los tiempos de contacto y las temperaturas.

- Modificación post-sintética de MOFs y nano-óxidos:

Post-tratamientos redox electroquímicos: En las películas de MOFs se realizarán tratamientos



redox para segregar especies de óxidos extra-framework altamente dispersas a partir de los elementos que forman parte de la red de estos materiales. Para ello se someterán películas de M-MOF (M: Cu, Fe) sintetizadas a tratamientos de voltametría cíclica y variantes de la misma, utilizando procedimientos clásicos.

Post-tratamientos mediante radiación UV: Los MOFs serán modificados mediante un tratamiento de exposición radiación ultravioleta. Recientemente, demostramos que esta metodología es capaz de generar desconexiones controladas en la estructura de MOFs, alterando sutilmente su química superficial y generando grupos superficiales sin alterar sustancialmente su arquitectura porosa ni cristalinidad. Se expondrán por diferentes tiempos (1-6 h) a radiación UV (lámpara TUV 15 W T8, 254,3 nm) manteniendo constante la potencia.

Introducción de nanopartículas de promotores: en las películas de nano-óxidos esto se efectuará por un lado, mediante la deposición de Nps preformadas a través de la técnica de dipcoating y por otro lado mediante sputtering. En MOFs se utilizará la impregnación-intercambio para la introducción de especies metálicas. Se buscará regular la uniformidad de deposición sobre estos materiales, tratando de controlar la dispersión o interfaces de contacto entre las especies de óxidos activos y promotores.

Evaluación de las propiedades catalíticas en la oxidación de CO (COTox y COProx): Los materiales se evaluarán en un sistema de reacción con reactor tubular para sólidos en polvo y en un módulo micro-reactor para el caso de las películas. A estos reactores se acopla un sistema de flujo con entrada y salida de gases, termocuplas y sistemas de control de temperatura. El módulo micro-reactor cuenta con calefacción mediante cartuchos e inserción de termocuplas directamente bajo las unidades catalíticas, permitiendo un control muy preciso de la temperatura. Los gases reactivos utilizados (CO, H₂, O₂, He) serán dosificados mediante controladores de flujo másico, mientras que la cuantificación de la conversión se realizará mediante un cromatógrafo gaseoso colocado en línea.

Evaluación de las propiedades electrocatalíticas: Se estudiará la actividad electrocatalítica frente a la rro y la reh de los MOFs y basados en Cu y Fe. Para garantizar el estudio de la rro y de la reh en condiciones de transporte de masa bien definidas se utilizarán métodos que definen estado estacionario ya sea mediante convección forzada (electrodo de disco rotante), o difusión esférica (microelectrodos). De este modo, electrodos de disco rotante (EDR) de carbón vítreo serán utilizados como soportes inertes para la deposición de los MOFs. La rro y la reh serán evaluadas sobre los electrodos de carbón (EDRs y MEs) con las películas activas mediante curvas de polarización estacionarias densidad de corriente (j) vs. sobrepotencial (η), luego de efectuar la caracterización de los mismos por voltametría cíclica.

Evaluaciones de actividad antifúngica: Los ensayos se realizarán suspendiendo 100 mg del material en 100 ml CEM (Caldo extracto de malta). Las suspensiones de medio de cultivo con el material a ensayar se distribuirán en tubos conteniendo la siembra de inóculos fúngicos (con una concentración ajustada en 105-106 propágulos fúngicos/mL). Luego, los tubos se taparán con tapa a rosca para asegurar condiciones de baja tensión de oxígeno y se incubarán a 28 °C por diferentes tiempos (0-48 h). Luego, para efectuar el recuento de las unidades formadoras de colonias (UFC), se empleará el método de diluciones seriadas con siembra en profundidad en Agar extracto de malta (AEM), en placas que se incubarán por 5 días. Finalmente, se hará el recuento de las UFC por triplicado.

Ensayo de los materiales en la captura de CO₂: se adquirirán isothermas de adsorción a bajas presiones y temperatura ambiente en un equipo de adsorción de equilibrio estático, en el que se admitirán dosis creciente de dióxido de carbono, luego de una evacuación previa a 200 °C por 2h en vacío dinámico. Por otra parte, también se efectuarán experimentos de captura dinámica en un equipo de análisis termogravimétrico (TGA), aplicando ciclos de flujo de dióxido de carbono (25 °C, 50 cm³ min⁻¹, 60 min) utilizando una mezcla de CO₂:He (50:50 v/v), que será intercalada con etapas de desorción mediante barrido en N₂, calentando la muestra de 25 a 200 °C a (10°C min⁻¹, flujo de N₂ a 50 mL min⁻¹). Estos ensayos permitirán analizar la capacidad de interacción con CO₂ a temperatura ambiente y presiones bajas como también presiones atmosféricas de MOFs con distintas variantes estructurales y tratamientos post-sintéticos.

Por último, en la caracterización de los materiales se utilizarán las siguientes técnicas instrumentales de caracterización:



- Difractómetro de rayos X (XRD)
- Equipo multitécnicas de superficies: espectroscopia Auger, espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS)
- Espectrómetro de infrarrojo (FTIR) con cámara de reflectancia difusa (DRIFT)
- Equipo de análisis textural por adsorción de N₂
- Espectrómetro Laser-Raman con cámara de reacción hasta 1000 °C
- Equipo de vacío y adsorción de moléculas sonda (CO)
- Estereomicroscopio con adquisición de imágenes
- Microscopio de fuerza atómica (AFM)
- Microscopio electroquímico de barrido
- Microscopio electrónico de barrido (SEM) con análisis elemental por rayos X (EPMA)
- Potenciostato de alta potencia
- Potenciostato de alta sensibilidad para operación con UMEs
- Equipo micro-reactor con sistema de flujo de gases y cromatógrafo
- Equipo de análisis térmico TGA-SDTA y DSC
- Equipo de síntesis por microondas
- Microscopio electrónico de transmisión (TEM) con análisis por EDS
- Equipo de Espectroscopia de Absorción Atómica (AAS)

- Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)

X	NO
	SI. Elija una de las opciones:
	a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
	b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
	c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
	d) Otro. Justifique.

- Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.

Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".

	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos: