

### 035 - Estudio del fenómeno de adsorción reversa en mezclas binarias considerando tamaño e interacciones laterales

**A.C. Buchini Labayen<sup>1</sup>, M.V. Dávila<sup>1,2</sup>, P.M. Pasinetti<sup>1,2</sup>, A.J. Ramirez Pastor<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - Universidad Nacional de San Luis

<sup>2</sup> Instituto de Física Aplicada CONICET-UNSL

\* [acbuchini@gmail.com](mailto:acbuchini@gmail.com)

Se ha observado en la adsorción de mezclas sobre superficies homogéneas que en algunos sistemas cuando se aumenta la presión una especie desplaza a otra, quedando en ocasiones sólo una de ellas presente en la superficie, esto es el fenómeno de adsorción reversa (Adsorption Preference Reversal). Este fenómeno se ha estudiado por un lado haciendo hincapié en las interacciones laterales entre moléculas adsorbidas, por medio de matriz transferencia<sup>1,2</sup>, simulación de Monte Carlo y campo medio<sup>3</sup>. Por otro lado en un trabajo posterior se estudió el mismo fenómeno considerando una mezcla  $k$ -mero/ $r$ -mero (partículas que ocupan  $k$  ( $r$ ) sitios de adsorción consecutivos), mediante el cálculo exacto en una dimensión, y se mostró que si se consideraban los distintos tamaños de las moléculas, el mismo ocurría incluso sin energía de interacción lateral<sup>4</sup>. En dos dimensiones no existe solución exacta a este problema por lo que ha sido necesario proponer diversas aproximaciones<sup>5</sup>, éstas describen la adsorción de mezclas de  $k$ -meros/ $r$ -meros teniendo en cuenta el tamaño, pero la influencia de las interacciones laterales fue introducida sólo mediante la aproximación de Bragg-Williams (campo medio).

En este trabajo avanzamos sobre este problema mediante la aproximación cuasi-química para mezclas  $k$ -mero/ $r$ -mero con interacciones laterales atractivas y repulsivas. Se analizan las isothermas de adsorción y el cruce de isothermas parciales, dando una descripción tanto de la influencia de las interacciones laterales como del tamaño de las especies.

#### Referencias

1. Z. Du, L. J. Dunne, G. Manos, M. F. Chaplin, *Chemical Physics Letters* 318, 319-324 (2000).
2. L. J. Dunne, G. Manos, Z. Du, *Chemical Physics Letters*, 377, 551-556 (2003).
3. A. Khettar, S. E. Jalili, L. J. Dunne, G. Manos, Z. Du, *Chemical Physics Letters*, 362, 414-418 (2002).
4. M. Dávila, J.L. Riccardo, A.J. Ramirez-Pastor, *Chemical Physics Letters*, 477, 402-405 (2009).
5. D. A. Matoz-Fernandez, M. V. Dávila, P. M. Pasinetti, A. J. Ramirez-Pastor. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16, 24063-24068 (2014).

### 036 - Cambios electrónicos inducidos por el crecimiento de una monocapa autoensamblada de polifeniltioles fluorados sobre nanoestructuras de Au(111)

**E. Colombo<sup>1</sup>, G. D. Belletti<sup>1\*</sup>, F. Tielens<sup>2</sup>, P. M. Quaino<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Instituto de Química Aplicada del Litoral (IQAL, CONICET – UNL), PRELINE (FIQ – UNL), Santa Fe, Argentina

<sup>2</sup> General Chemistry (ALGC), Vrije Universiteit Brussel (Free University Brussels - VUB), Bruselas, Bélgica

\* [gbelletti@fiq.unl.edu.ar](mailto:gbelletti@fiq.unl.edu.ar)

Diferentes interfaces orgánicas, mecánicamente flexibles y de gran superficie, son foco de estudio en la actualidad debido a su posible aplicación en dispositivos electrónicos tales como transistores, diodos emisores de luz (LED) y células fotovoltaicas. En este tipo de dispositivos, la interface entre la capa semiconductor orgánica y el electrodo juega un papel importante en el rendimiento. El objetivo principal de la monocapa orgánica consiste en modificar las características electrónicas de la superficie metálica mediante la adaptación de la función trabajo según la necesidad específica buscada. Particularmente, la utilización de electrodos metálicos modificados con moléculas polares ha mostrado mejorar la inyección del portador de carga en transistores y LED orgánicos. A su vez, electrodos modificados con bencenotioles sustituidos con grupos fluoruro, nitro, ciano, entre otros, han mejorado su rendimiento.

En el presente trabajo exploramos la modificación de las propiedades electrónicas del sustrato inducidas por la adsorción de polifeniltioles fluorados. El enfoque se realizó mediante estudios teóricos basados en cálculos