

En este trabajo mostramos que el procedimiento de discretización como se lo aplica usualmente no es autoconsistente, excepto cuando la cantidad de modos es tan grande que introduce degeneraciones no físicas en el espectro. Desarrollamos una corrección a los estimadores usuales del espectro que resuelve el problema de la autoconsistencia. Utilizando técnicas Bayesianas, proponemos un procedimiento que permite estimar el espectro de relajación con una precisión limitada solamente por los datos experimentales, y determinar los correspondientes intervalos de confianza.

142. Theoretical analysis of the effect in the band gap energy in a family of materials systematically halogenated: Role of the exact exchange energy.

Cortés Santiago A¹, Pacio Castillo M², Alvarado García J A², Juárez Santiesteban H², Osorio de la Rosa E²

¹ Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

² Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

In the last two decades, several scientific report have carried out deep research into organic molecules (OM) in the study of optical properties for its application as a base material in the construction of optoelectronic devices and organic lasers. In this report, we theoretically analyze four different imines, the change is made systematically of the substituent (-F, -Cl and -Br) in the para-position the extreme of each molecule. Some properties are examined associated with the optical absorption and emission behavior, such as the effects generated by the electrostatic interactions of short, medium and long range. In order to estimate the band gap energy in these systems, we have employed methods based in the density functional theory within the Kohn-Sham model. We found that hybrid methods based on the adiabatic connection manifests a good performance in terms of band gap energy prediction concurring well with experimental observation.

143. Adsorción de átomos de hidrógeno y oxígeno en superficies de Cu (100) y Ag(100) mediante DFT, simulación de Monte Carlo y Aproximación de Racimo

Sanchez Varretti F O¹, Gomez E d V², Avelle L B², Bulnes F M³, Gimenez M C², Ramirez Pastor A J³

¹ Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional San Rafael

² Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, FAMAF-UNC, Argentina

³ Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL

Se sabe que los sólidos tienen la capacidad de retener grandes cantidades de gases o vapores condensables, motivo por el cual la físicoquímica de superficies encuentra aplicación en nuevas tecnologías y diversas ramas industriales. De no ser controlados estos gases traerían aparejados problemas al medio ambiente como la lluvia ácida, corrosión, disminución de la capa de ozono e incremento de la toxicidad del aire. Es por esto que es de vital importancia contar con herramientas, tanto experimentales como teóricas, para comprender las interacciones sólido-gas. Es por todo esto que se hace imprescindible el desarrollo de modelos novedosos y nuevas herramientas computacionales que den cuenta de este fenómeno. En particular la adsorción de hidrógeno en superficies de Cu(100) y de Ag(100) y de oxígeno en

superficies de Cu(100) puede ser estudiada mediante diferentes herramientas computacionales. Para representar este sistema real se realizaron cálculos de DFT con los cuales se obtuvieron las energías de adsorción de un átomo de hidrógeno o de oxígeno en diferentes entornos, de acuerdo con el número de primeros vecinos presentes en cada sitio de adsorción. Esta información se empleó luego en simulaciones de Monte Carlo y en la Aproximación de Racimo para diferentes temperaturas. Se observó un comportamiento interesante de la fase adsorbida que se evidencia en los resultados obtenidos para las isothermas de adsorción, además concluimos que ambos métodos utilizados concuerdan en gran medida para los valores energéticos calculados.

144. Adsorción y desorción de monocapas auto-ensambladas de L-cisteína sobre superficies de Au(001) y Au(111).

Franco V¹, Passeggi M², Ruano G², Cristina L J^{1, 2}

¹ Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET)

² Instituto de Física de Santa Fe - IFIS - CONICET

La funcionalización de superficies metálicas mediante moléculas orgánicas y la fabricación de arquitecturas supramoleculares presentan un número creciente de aplicaciones en varios campos como electrónica, óptica y biotecnología. El desarrollo y optimización de dispositivos demandan una exhaustiva comprensión de las propiedades químicas y físicas de la interface orgánica/inorgánica, y del proceso de autoensamblado. Las superficies bioactivas adquirieron notable relevancia estimulando la investigación de aminoácidos, péptidos, proteínas y cadenas de ADN. Las monocapas auto-ensambladas (SAMs) de aminoácidos, las biomoléculas más simples, recibieron especial atención debido a la posibilidad de abordar, a un nivel razonablemente manejable de complejidad, cuestiones desafiantes como la influencia de la multifuncionalidad en las propiedades de auto-ensamblado y quiralidad en sistemas bidimensionales. Entre los 20 aminoácidos esenciales, la L-cisteína ($H_2N-CH(CH_2SH)-COOH$), que tiene un grupo de cabeza tiol, merece un interés particular como enlazante de biomoléculas más grandes y como sensor químico de iones metálicos. En este trabajo se estudió la formación de SAMs de moléculas de L-cisteína sobre superficies no reconstruidas de monocristales de Au(001) y Au(111) con el fin de esclarecer el rol de las diferentes caras cristalográficas en los mecanismos de adsorción molecular. Se investigó la influencia de la naturaleza química de este aminoácido y las interacciones intermoleculares (van der Waals e hidrofóbicas) durante el proceso de auto-organización, su polimerización, y estabilidad química y térmica en las superficies de oro. La adsorción de moléculas se realizó por inmersión de los sustratos (dipping) en soluciones de cisteína analizando ciertos parámetros como: solvente, concentración, tiempo de incubación y luz. Mediante microscopía de efecto túnel (STM) en aire se examinó la estructura molecular, el orden, y la reconstrucción que induce el proceso de quimisorción y/o fisisorción de estas moléculas en los sustratos, identificando los sitios de adsorción preferenciales. Utilizando espectroscopía de fotoemisión de rayos X (XPS) se evaluó la calidad y composición química de las SAMs identificando los grupos funcionales involucrados en la formación de la película, y se determinó el cubrimiento superficial de saturación. Las asignaciones de las componentes de los espectros de XPS se contrastaron con los resultados obtenidos con STM para las mismas condiciones. Además, se estudió la estabilidad