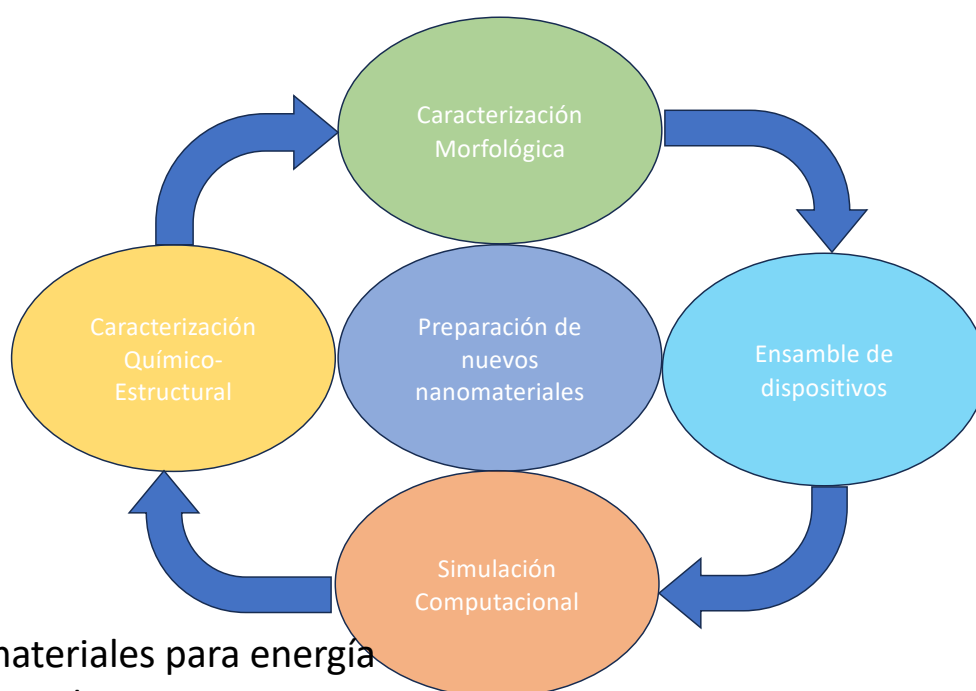


# “Nanotecnología y Nuevos Materiales”



**Dr. Ricardo Faccio**  
DETEMA  
Facultad de Química  
Universidad de la República  
[rfaccio@fq.edu.uy](mailto:rfaccio@fq.edu.uy)



- Nanomateriales para energía
- Biomateriales
- Bioelectrónica

# Capacidades Instaladas

Capacidades en CeFI !

## • Síntesis

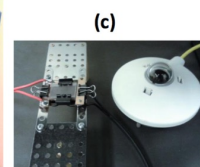
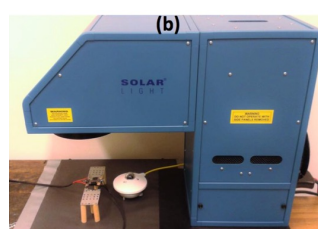
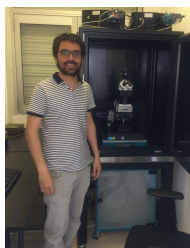
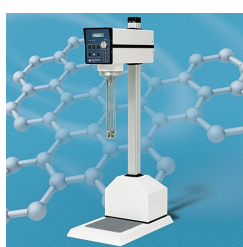
- Reactores hidrotermal
- Silverson Mixer (grafeno)
- CVD (grafeno)
- Impresión 3D
  - Biomateriales
  - Convencional
- Sonoplot (2D printing)
- Plasma Sputtering

## • Caracterización Estructural

- Difracción de rayos X de Polvo
- Difracción de rayos X de bajo ángulo (nanomateriales).
- Difracción de rayos X de capas finas.
- Microscopio Raman Confocal
- Microscopio de Fuerza Atómica AFM

## • Caracterización Física

- Simulador Solar
- Espectroscopia de Impedancias
  - IMPS/IMVS
  - Eléctrica
  - Electroquímica.
- Propiedades ópticas:
  - UV-vis Sólidos
  - Thorlabs



# Síntesis y preparación

## • Grafeno y Óxido de grafeno:

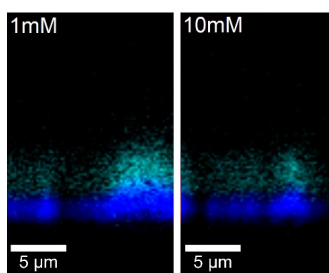
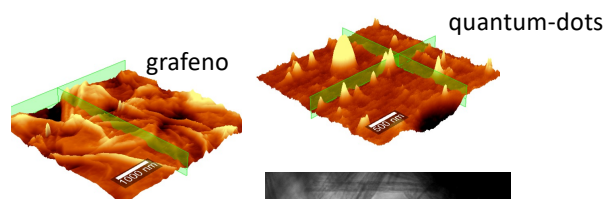
- biomateriales
- polímeros conductores

## • Titanatos nanoestructurados:

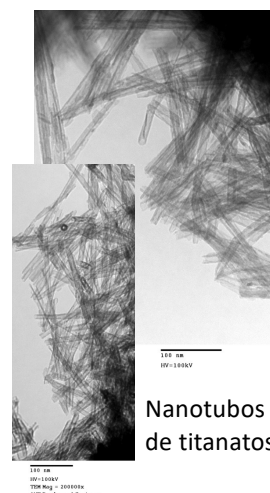
- Celdas solares y electrolitos de baterías

## • Compósitos Poliméricos

- Celdas Solares
- OECD: transistores orgánicos electroquímicos
- bioelectrónica



Thin film polimérico



Nanotubos de titanatos

# Celdas Solares

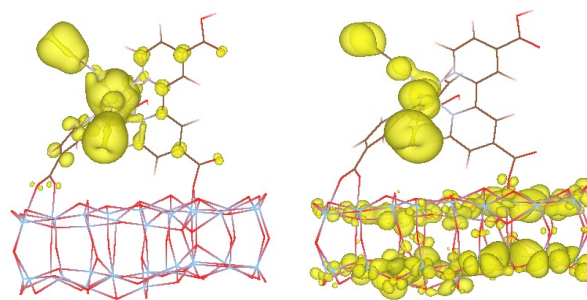
Obtener nuevos nanomateriales que mejoren las propiedades ópticas y la respuesta de fotoelectrodos para conversión de energía solar a eléctrica.



Synthesis, characterization and simulation of lithium titanate nanotubes for dye sensitized solar cells

Martín Esteves<sup>a</sup>, Luciana Fernández-Werner<sup>a,\*</sup>, Fernando Pignatelli<sup>a</sup>, Benjamín Montenegro<sup>a</sup>, Marcelo Belluzzi<sup>b</sup>, Mariela Pistón<sup>b</sup>, Mauricio Rodríguez Chialanza<sup>c,d</sup>, Ricardo Faccio<sup>a,\*</sup>, Álvaro W. Mombrú<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Centro NanoMat, DEYEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay  
<sup>b</sup> Grupo de Análisis de Elementos Traza y desarrollo de estrategias simples para preparación de muestras (GATPREM), Área Química Analítica, DEC, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay  
<sup>c</sup> Centro Universitario Regional del Este, Universidad de la República, Rocha, Uruguay  
<sup>d</sup> Cátedra de Radiación, Departamento Estudios Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay



HOMO

LUMO

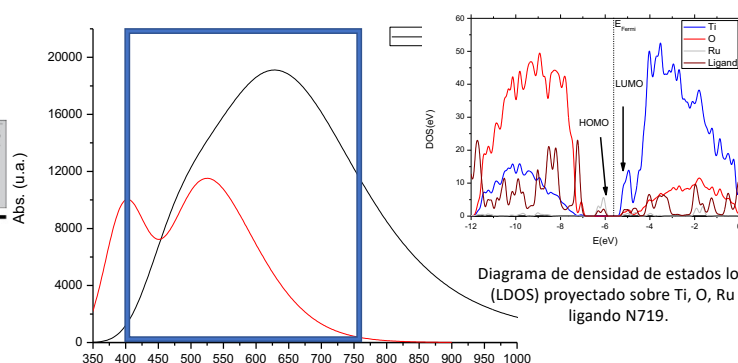
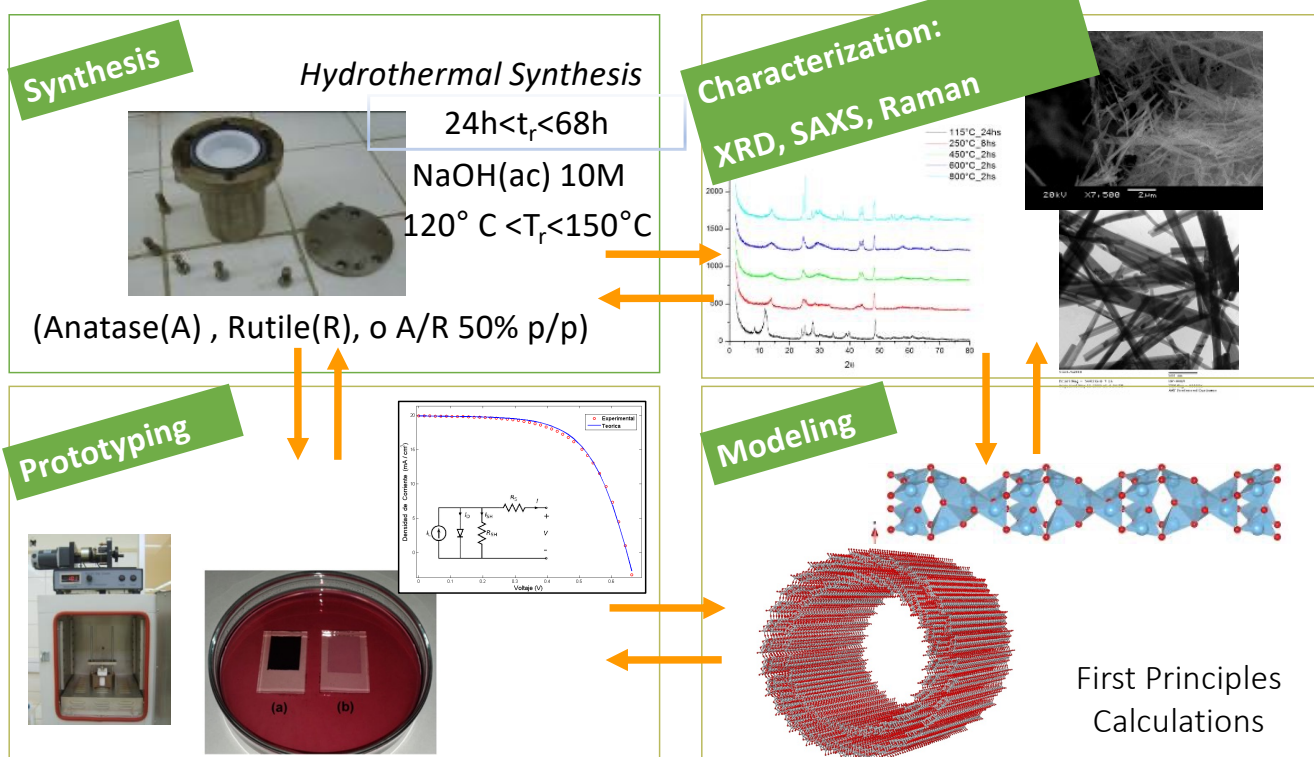


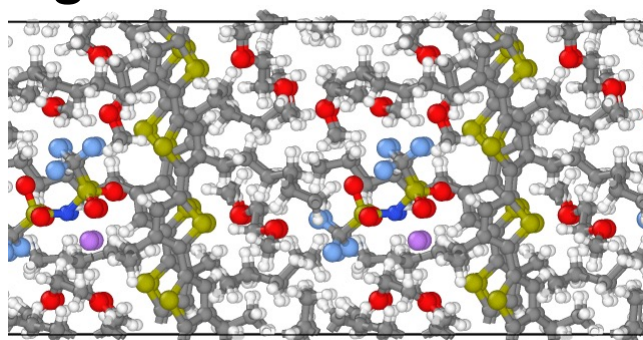
Diagrama de densidad de estados local (LDOS) proyectado sobre Ti, O, Ru y ligando N719.

$\lambda(\text{nm})$   
N719 Dye on top of a nanoparticle model of TiO<sub>2</sub>(B)



# Almacenamiento de Energía

Obtener nuevos nanomateriales y compósitos poliméricos, que mejoren la conductividad iónica de electrolitos para baterías de ion-litio e ión-sodio.



Modificaciones a polímeros Conductores P3HT

- Transferencia de carga
- Difusión de iones
- Mecanismo bi-polarónicos
- Aplicación en celdas solares.

Macromolecules

Monday's talk!

pubs.acs.org/Macromolecules

Article

**Ab Initio Molecular Dynamics Assessment on the Mixed Ionic–Electronic Transport for Crystalline Poly(3-Hexylthiophene) Using Full Explicit Lithium-Based Dopants and Additives**

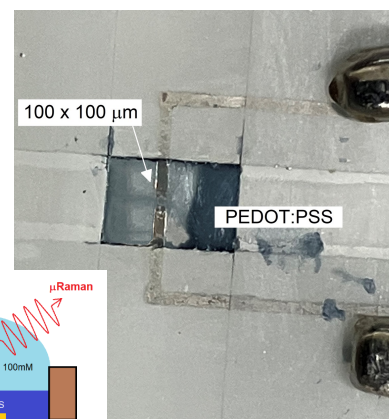
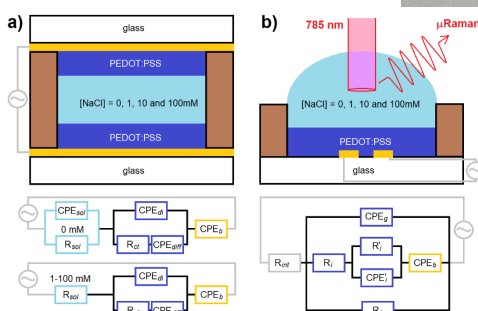
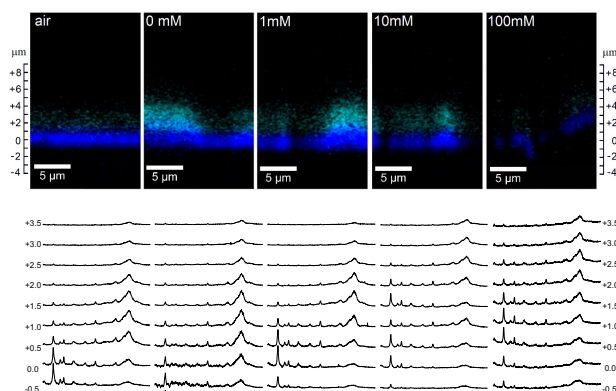
Dominique Momburú, Mariano Romero,\* Ricardo Faccio,\* and Álvaro W. Momburú\*

Cite This: *Macromolecules* 2022, 55, 113–124

Read Online

# Transistores orgánicos electroquímicos

Preparación, caracterización y simulación de materiales (polímeros conductores e hidrogeles) para dispositivos de detección de iones y otros metabolitos de interés biológico (bioelectrónica).



Romero et al. *ACS Appl. Electron. Mater.* (Under revision)

# Modelado Molecular

Estructura electrónica y dinámica molecular ab initio en sistemas nanoestructurados. (VASP + Machine Learning).

Nuevas propiedades electrónicas (ópticas y magnéticas).

Nuevos mecanismos de reacción sobre superficies.

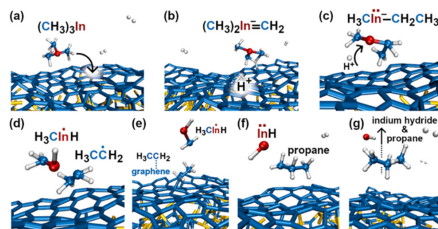
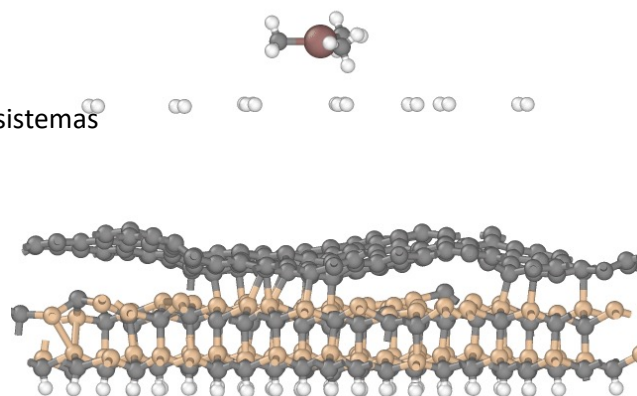


Fig. 2 (Simulation#1) Sequence of trimethylindium ( $(\text{CH}_3)_3\text{In}$ ) reactions on graphene/SiC (0001) as observed in AIMD simulations at 3500 K. The dynamic bonds have cutoff lengths of 2.2 Å.



ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

PCCP

PAPER

Check for updates

Cite this: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, 25, 829

**Discovering atomistic pathways for supply of metal atoms from methyl-based precursors to graphene surface†**

Davide G. Sangiovanni,<sup>a</sup> Ricardo Faccio,<sup>b</sup> Gueorgui Kostov Gueorguiev<sup>a</sup> and Anelia Kakanakova-Georgieva<sup>a\*</sup>

## Integrantes

- Dr. Álvaro W. Mombrú
- Dra. Helena Pardo
- Dr. Mariano Romero
- Dra. Luciana Fernández-Werner
- Dra. Dominique Mombrú
- Lic. Benjamín Montenegro
- Lic. Fernando Pignanelli
- Lic. Martín Esteves
- BSc. Tatiana Gregorio

UDELAR  
FO  
FACULTAD DE QUÍMICA

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

DETEMA  
DEPARTAMENTO DE EXPERIMENTACIÓN Y TEORÍA DE LA ESTRUCTURA DE LA MATERIA Y SUS APLICACIONES

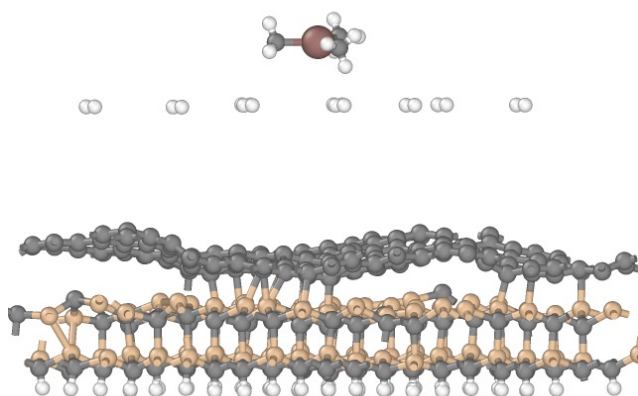
CSIC COMISIÓN SECTORIAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA

polo tecnológico  
química - biotecnología

PCTP  
Parque Científico Tecnológico de Pando

PEDECIBA

ANII AGENCIA NACIONAL DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN



# ¿Preguntas?

[rfaccio@fq.edu.uy](mailto:rfaccio@fq.edu.uy)



DEPARTAMENTO DE EXPERIMENTACIÓN Y TEORÍA DE LA  
ESTRUCTURA DE LA MATERIA Y SUS APLICACIONES

<https://detema.fq.edu.uy/fisica/Publicaciones.html>