

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Propiedades físicas y de detección de elemento volátiles en óxidos semiconductores**

Apellido y Nombres del director: **Saleta, Martín Eduardo**

Teléfono: **4445158**

Dirección electrónica del director (ingresar una sola dirección): **martin.saleta@ib.edu.ar**

Cargo IB: **Jefe de Trabajos Prácticos**

¿Propone codirector? : **NO**

Datos Co-director:

Dirección electrónica del codirector (ingresar una sola dirección):

Título máximo alcanzado del codirector (Doctor, Magister, otros) :

Cargo docente del codirector en el IB (no excluyente):

Justifique brevemente el rol del Codirector:

Lugar de realización: **División Resonancias Magnéticas y Laboratorio de Química del Instituto de Nanociencia y Nanotecnología**

DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

Física Tecnológica

Breve descripción: **OBJETIVO:**

El objetivo de este trabajo experimental, en el área de la Física Tecnológica y Ciencias de Materiales, tiene como objetivo principal aportar conocimiento y comprensión de las propiedades de detección de gases y compuestos orgánicos volátiles (VOCs) de óxidos semiconductores. Se analizarán los mecanismos básicos que intervienen en la detección aprovechando la enorme variedad de estos óxidos y su gran versatilidad.

En particular, estudiaremos materiales sintetizados por diferentes técnicas (principalmente Sol-Gel, reacción de estado sólido y spray pirólisis) que nos permitirán obtener el mismo compuesto desde la escala nanométrica hasta el material masivo (bulk). Además, en el caso de los materiales nanoestructurados, esperamos obtener materiales con diferentes morfologías y bordes de grano variando los procesos de síntesis empleados. Nos enfocaremos en el estudio de las interfaces entre granos para comprender los procesos involucrados en la detección de gases y VOCs.

Para evaluar si el material tiene viabilidad como detector se medirá la variación de la resistencia eléctrica de éste al ser expuesto a un flujo controlado de gas o VOC (analito). En forma complementaria se estudiará por resonancia de espín electrónico los efectos que produce el analito en estudio. Estos estudios se realizarán con el fin de deducir e interpretar el mecanismo físico-químico que permite la detección del gas o VOC. Para el estudio de la influencia de las interfaces de borde de grano de los materiales se medirán curvas de espectroscopía de impedancia. Esta técnica permite deconvolucionar la contribución a la conducción del borde del grano y del interior del grano.

El conocimiento adquirido durante el desarrollo del proyecto nos permitirá diseñar nuevos óxidos (puros o mezcla de ellos, composites) con el fin de desarrollar una potencial aplicación tecnológica, ya

sea con uso industrial, diagnóstico médico y/o salvaguardar la salud y el medioambiente.

RELEVANCIA / ANTECEDENTES

En este proyecto abordaremos el estudio de materiales para la detección de gases, hidrocarburos y compuestos orgánicos volátiles (VOCs) nocivos para el ser humano, animales y medio ambiente. El estudio de este tipo de materiales es un tema de mucho interés en la comunidad científica. Tiene grandes perspectivas tanto desde el punto de vista académico como tecnológico, abarcando varias áreas como pueden ser la ciencia y tecnología de los alimentos, seguridad industrial, detección de enfermedades y control del impacto antropogénico en el medio ambiente, por mencionar algunos ejemplos. El desarrollo y diseño de este tipo de materiales es un área en la ciencia y tecnología de los materiales en constante crecimiento en la cual se ha puesto y se está poniendo un gran esfuerzo de investigación.

Existen varios tipos de dispositivos y materiales que transforman en una señal medible la variación de sus propiedades físicas y químicas ante la presencia de un gas o VOC. Alguno de estos sistemas son los sensores químicos y biosensores basados en óxidos semiconductores, los cuales se han vuelto de uso masivo debido a su gran campo de aplicación, a su pequeño tamaño y a su sencilla fabricación. Poseen una alta sensibilidad permitiéndoles detectar concentraciones muy bajas (~ppm), son durables y operan en un amplio rango de temperatura. Lamentablemente, este tipo sensores tiene en su contra que, en principio, no son específicos, es decir responden a varios gases o VOCs al mismo tiempo. Debido a esta desventaja es muy importante diseñar nuevos materiales que posean alta sensibilidad y también selectividad manteniendo una estabilidad en el tiempo. El término selectividad se refiere a características que determinan si un sensor puede responder selectivamente a un grupo de compuestos o incluso específicamente a un solo compuesto. En la actualidad para aumentar la selectividad de un sensor (o un dispositivo) existen, al menos, tres estrategias: a) Diseñar nuevos materiales, b) Arreglo de sensores (narices electrónicas) y c) Fabricar Heteroestructuras (compositos, nanopartículas embebidas en matrices y partículas carozo/cáscara).

En el área del diagnóstico de enfermedades se buscan materiales sensibles a pequeñas concentraciones de diferentes VOCs, los cuales permiten detectar diferentes enfermedades. Por ejemplo, se busca detectar vapores de acetona con el fin de diagnosticar y monitorear cetoacidosis diabética (CAD) a partir del aliento del paciente (como ocurre con los detectores portátiles de alcoholemia). Esto permitiría realizar diagnóstico y control de la diabetes de una manera menos invasiva. Los pacientes sanos presentan en su aliento una concentración entre 0.3 y 0.9 ppm de acetona, mientras que los pacientes diabéticos tienen concentraciones superiores. Un tema importante a estudiar en este tipo de materiales, al igual que en los casos anteriormente expuestos, es la selectividad, por ejemplo, frente a la humedad ambiente (el aliento posee un 90% humedad relativa), CO₂, y O₂, además de otros VOCs producidos por diferentes enfermedades, como los compuestos sulfúricos volátiles, amoníaco o aldehídos por mencionar algunos ejemplos [Wang, 2009]. Adicionalmente, en dietas denominadas cetónicas, las cuales han demostrado cierto éxito en el tratamiento de la epilepsia, el cuerpo produce cuerpos cetónicos en exceso debido a la gran ingesta de grasas y en la cual es primordial monitorear el nivel de acetona en el cuerpo. Actualmente existen tiras reactivas que permiten controlar estos niveles analizando la orina, pero se ha propuesto estudiar el aliento y de esta manera cuantificar el contenido de acetona en cuerpo del paciente.

En síntesis, podemos resumir este proyecto como un desafío actual en la Ciencia y Tecnología de Materiales, centrado en la búsqueda de nuevos materiales o compositos con mayor sensibilidad y mayor selectividad, que permitan realizar sensores durables, más simples, eficientes y de bajo costo.

METODOLOGÍA: Etapas de la investigación

- 1. Síntesis y fabricación de esferas nanoestructuradas, polvos nanométricos y materiales masivos semiconductores.** La síntesis se realizará por aerosol de soluciones acuosas (spray pirólisis), métodos químicos y físicos. El fin es diseñar y obtener muestras de alta calidad con propiedades de detección de gases y VOCs.
- 2. Estudio estructural, composicional, morfológico y vibracional exhaustivo de las muestras**

preparadas. Se utilizarán técnicas de microscopía electrónica, difracción de rayos X y espectroscopía infra-rojo.

3. Estudio de las propiedades de detección, magnéticas y eléctricas utilizando técnicas de magnetometría dc, ESR, transporte eléctrico dc y ac, capacidad y poder termoeléctrico. Específicamente se realizarán mediciones de propiedades eléctricas en presencia de gases o VOCs, para estudiar la respuesta, sensibilidad y selectividad del material o composito. Se medirá espectroscopía ESR in situ a diferentes atmósferas.

4. Interpretación y análisis de los resultados – Escritura de tesis. La interpretación, confirmación de hipótesis, replanteo y análisis de los resultados se realizará en forma paralela a los puntos anteriores, siempre con el objetivo de comprender cuánto influyen la composición morfología e interfaces entre granos sobre las propiedades físico-químicas de los materiales. A partir de estas interpretaciones y análisis se publicarán y comunicarán los resultados obtenidos. Esta etapa incluye la redacción de la tesis final del trabajo.

Metodología principal: **Experimental**

Metodología secundaria:

Información adicional:

¿Propone que el tema sea considerado para suplemento de beca por tema prioritario?**NO**

Justifique porqué su propuesta debe ser considerada como tema prioritario:

Indique Gerente o Jefe de Departamento que avala su petición: