



Universidad Nacional de Catamarca
Consejo Superior

SAN FERNANDO DEL VALLE DE CATAMARCA, 24 OCT. 2017

VISTO: La presentación efectuada por la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales mediante la cual eleva a consideración del Consejo Superior el Proyecto de creación de la carrera de Posgrado Interinstitucional "Doctorado en Energías Renovables", aprobada por Resolución C.D.F.C.E. y N. N° 089/17 a desarrollar entre la Universidad Nacional de Catamarca, la Universidad Nacional de Córdoba y la Universidad Nacional para la Defensa; tramitado por Expediente S01-0001441/2017, y,

CONSIDERANDO :

Que uno de los objetivos de la Universidad Nacional de Catamarca (UNCA) es la formación de recursos humanos genuinos del más alto nivel científico y tecnológico, con la finalidad de propiciar el desarrollo de la propia institución, la región y el país.

Que el proyecto de creación de la carrera fue aprobada en Sesión Extraordinaria del Consejo Directivo de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FACEN) por Resolución C.D.F.C.E.Y N. N° 089/17.

Que el doctorado en Energías Renovables se presenta con el objetivo de lograr la formación de recursos humanos calificados, de alto nivel científico, en condiciones de orientarse hacia la actualización y formación continua para dar una respuesta a las necesidades actuales de contar con recursos humanos altamente capacitados en el desarrollo e investigación en área de las Energías Renovables para contribuir al Desarrollo Sostenible de la provincia de Catamarca y de la Región NOA del país.

Que existe en la FACEN y en la UNCA una línea de acción estratégica que sustenta la necesidad de alcanzar mejoras sustantivas de calidad en la formación de recursos humanos con el convencimiento de que ha de lograrse mediante la consolidación de los vínculos de cooperación, intercambio y trabajo conjunto con instituciones universitarias del país que cuentan con posgrados acreditados de calidad y con una extensa y reconocida trayectoria en la formación de recursos humanos.

Que la FACEN ofrece titulaciones de Posgrado que buscan responder a las demandas de sectores específicos en base a una intensa y decidida búsqueda a la solución de los problemas; generadas en primer término por el crecimiento de las instituciones de investigación y además por los constantes retos de capacitación y especialización que la provincia de Catamarca, la región y el país requieren.

Que la FACEN ha logrado conformar un interesante entramado de instituciones vinculadas a través de convenios, entre las que se destacan la Facultad de Matemática, Astronomía y Física de la Universidad Nacional de Córdoba y el Instituto Universitario Aeronáutico de la Universidad Nacional para la Defensa y que se hace necesario actualmente intensificar las relaciones a través de nuevos convenios y actividades interinstitucionales.

Que el Desarrollo Sostenible de la provincia y la región es sin duda uno de los campos claves entre los desafíos tecnológicos existentes en la actualidad, tanto por su incidencia en el bienestar personal y colectivo, como por su influencia en la



competitividad económica regional, como también por las repercusiones medioambientales.

Que en el contexto Nacional es necesario que desde las Universidades Nacionales exista un claro compromiso con los desafíos necesarios para lograr desarrollos tecnológicos innovadores o avanzados en tecnologías energéticas limpias y no contaminantes para el mejor aprovechamiento de las energías renovables.

Que por ello en el desarrollo de un programa de doctorado que busca la formación de calidad de Doctores en Energías Renovables, se precisa transmitir conocimientos de Física, Química, Electroquímica, Ingeniería y sobre todo es menester propender a la formación interdisciplinaria con una clara vocación integradora. Constituyéndose así, el Programa del Doctorado en Energías Renovables en lugar de encuentro de un conjunto amplio de docentes-investigadores con intereses comunes en las líneas desarrolladas y que poseen un gran potencial formativo e investigador.

Que en el marco del Programa de Desarrollo de Posgrados PERHID-CIN y sustentado en la intensa cooperación y trabajo conjunto que se lleva adelante desde hace más de 20 años con la Universidad Nacional de Córdoba (UNC) específicamente con la Facultad de Matemática, Astronomía y Física (FAMAF), en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FACEN) de la Universidad Nacional de Catamarca (UNCA) se decide la creación de la carrera Doctorado en Energías Renovables.

Que en el marco del Programa Estratégico de Formación de Recursos Humanos en Investigación y Desarrollo-PERHID-CIN del año 2015 se ha logrado constituir una red entre la UNC y la UNCA; participando en la constitución de la red las Facultades de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, la Facultad de Ciencias Químicas y la Facultad de Matemática, Astronomía y Física por parte de la UNC; y la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales por parte de la UNCA.

Que se presentó en el marco del PERHID-CIN el proyecto de creación del Doctorado en Energías Renovables, el que resultó evaluado satisfactoriamente.

Que al referido proyecto de creación de la carrera se ha integrado el Instituto Universitario Aeronáutico (IUA) dependiente de Universidad Nacional para la Defensa (UNDEF) como miembro activo para el dictado de la carrera.

Que existe entre las instituciones integrantes de la Red, UNC y UNCA suficientes recursos humanos con formación académica y científica en el área de las energías; específicamente en las áreas de energía solar fotovoltaica y térmica, energía eólica, energía hidráulica, geotérmica, vector hidrógeno y celdas de combustible; que dan sustento a respectivas líneas de investigación y desarrollo. Estas líneas de investigación y desarrollo son el soporte fundamental que permiten dar forma a la carrera del Doctorado en Energías Renovables.

Que la UNCA es el principal beneficiario con un doctorado de esta naturaleza que reviste importancia por cuanto en la región no existen doctorados acreditados en el área de energía.



Universidad Nacional de Catamarca
Consejo Superior

Que en el desarrollo del proyecto de carrera han intervenido las respectivas comisiones curriculares designadas al efecto por cada una de las instituciones participantes.

Que se presenta el proyecto de carrera con su diseño curricular y propuesta de reglamento.

Que la sede de la administrativa de la carrera será la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FACEN) de la UNCA.

Que ha tomado intervención la Comisión de Asuntos Académicos y de Investigación de este Cuerpo produciendo dictamen favorable.

Que en uso de las facultades conferidas por el Estatuto universitario vigente

Por ello :

EL CONSEJO SUPERIOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE CATAMARCA
(En Sesión Extraordinaria del día 23OCTUBRE2017)
ORDENA

ARTÍCULO 1°.- APROBAR la creación de la Carrera de Posgrado Interinstitucional "Doctorado en Energías Renovables", a desarrollar entre la Universidad Nacional de Catamarca con sede en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, la Universidad Nacional de Córdoba y la Universidad Nacional para la Defensa

ARTÍCULO 2°.- APROBAR el diseño curricular para la carrera de Posgrado Interinstitucional "Doctorado en Energías Renovables" y el Reglamento de la carrera, cuyos textos se consignan como Anexo I y Anexo II respectivamente.

ARTÍCULO 3°.- REGISTRAR. Comunicar a las áreas de competencia. Cumplido. Archivar.

ORDENANZA C.S. N°009/2017




Lic. PATRICIA EVANGELINA CAFFETARO
SEC. ACADÉMICA Y DE POSGRADO
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CATAMARCA

ING. AGRIM. FLAVIO SERGIO FAMA
RECTOR
UNIV. NAC. DE CATAMARCA



ANEXO I

Contenidos curriculares

El alumno de la carrera de Doctorado en Energías Renovables deberá cursar y aprobar, de acuerdo a lo establecido en el Artículo 2, inciso e, del Reglamento de la carrera de Doctorado en Energías Renovables (Anexo III del Plan de Estudios) el Curso General Obligatorio y reunir un mínimo de 10 créditos mediante los cursos específicos que apruebe. El curso General Obligatorio deberá ser cursado en el primer año de la Carrera. Además deberá aprobar un examen de inglés según lo especificado en Anexo II del Plan de Estudios de la Carrera.

[Handwritten signature]



Curso obligatorio de la carrera de Doctorado en Energías Renovables

Ambiente, Sustentabilidad y Energía.

Carga horaria: 60 hs.

Introducción:

La relación entre Energía y Ambiente es sin duda uno de los campos claves entre los desafíos tecnológicos existentes en la actualidad, tanto por su incidencia en el bienestar personal y colectivo, como por su influencia en la competitividad económica regional, y también por las repercusiones medioambientales.

Objetivos:

1. Estudiar el concepto de Ambiente como sistema complejo y el papel de la energía en la relación sociedad - naturaleza.
2. Entender el paradigma de la sustentabilidad en el marco de los ciclos biogeoquímicos de la Tierra y el componente energético con el que funcionan.
3. Analizar la situación actual, regional y local de los recursos energéticos y la problemática ambiental asociada.
4. Generar un pensamiento crítico basado en el conocimiento científico acerca de la problemática energética regional y local, de la problemática ambiental asociada y de los desafíos de la sustentabilidad.
5. Brindar un panorama general de las energías renovables con una visión holística que brinde herramientas para comprender la interacción ambiente, sustentabilidad y energía.

Programa analítico:

Unidad I:

Ambiente: Concepto. Sistemas y subsistemas. Sistemas complejos. Los ciclos biogeoquímicos del planeta y el flujo de la materia y la energía en los ecosistemas: el ciclo del agua, carbono, del nitrógeno, azufre. Bienes y servicios ecosistémicos. Relaciones entre agua, producción de alimentos y energía. Los límites planetarios al crecimiento.

Unidad II:



Indicadores de sustentabilidad. El rol de la energía en el desarrollo sustentable. Modelos de desarrollo sustentable. Problemática ambiental, relación sociedad-naturaleza y energía. Historia ambiental latinoamericana y de Argentina, y su relación con los recursos energéticos. Sustentabilidad: Concepto desde la perspectiva del desarrollo. Objetivos de la sustentabilidad.

Unidad III:

Cambios globales. Cambio climático(CC). Cambio climático natural y antropogénico. Escalas de tiempo del cambio climático. Emisiones de gases de efecto invernadero. Inventarios de gases. Indicadores del cambio climático. Efectos del CC sobre las comunidades naturales. Pérdida de sincronía de los ecosistemas. Escenarios de cambio climático. Cambio climático y colapsos sociales. Adaptación y Mitigación.

Unidad IV:

Introducción sobre Energías: Un poco de historia, Tipos de fuentes. Tipos de transporte, tipos de usos finales, etc. Panorama energético mundial, Situación actual - Generación, almacenamientos, usos finales, sistemas vehiculares, sistemas estacionarios, Matriz energética y eléctrica, Modelos de reservas de hidrocarburos - Curva de Hubber.

Unidad VI:

Tecnología para el uso de las E.R., Vectores Energéticos : Celdas de combustible y usos del Hidrógeno, Biomasa, biodiesel, Electricidad. Fuentes renovables: Energía solar térmica, Energía solar fotoeléctrica, Energía eólica, Energía hidroeléctrica y micro hidroeléctrica. Sistemas de almacenamiento

Unidad VII:

Política energética y ambiental. Incentivos para el uso de las E.R., Situación actual en Argentina y América Latina, Proyectos realizados y proyectos futuros

Metodología de trabajo:

Se trabajará en una modalidad teórico - práctica que incluye presentaciones orales por parte de los docentes; lectura y discusión de artículos científicos o de divulgación; presentación y resolución de situaciones problemáticas; debates y argumentaciones fundadas sobre temas que generen diversidad de opiniones.

Modalidad del examen: Presentación de un trabajo escrito.



13. Pereíra, H. M. et al. 2010. Scenarios for global biodiversity in the 21st Century. *Science* 330: 1496-1501.
14. Recalde, M. Y., Bouille, D. H. y Girardin, L. O.. 2015. Limitaciones para el desarrollo de energías renovables en Argentina. *Problemas del desarrollo*, 46(183), 89-115. <https://dx.doi.org/10.1016/j.rpd.2015.10.005>
15. Rockström, J., W. Steffen, K. Noone, Å. Persson, F. S. Chapin, III, E. Lambin, T. M. Lenton, M. Scheffer, C. Folke, H. Schellnhuber, B. Nykvist, C. A. De Wit, T. Hughes, S. van der Leeuw, H. Rodhe, S. Sörlin, P. K. Snyder, R. Costanza, U. Svedin, M. Falkenmark, L. Karlberg, R. W. Corell, V. J. Fabry, J. Hansen, B. Walker, D. Liverman, K. Richardson, P. Crutzen, and J. Foley. 2009. Planetary boundaries: exploring the safe operating space for humanity. *Ecology and Society* 14(2): 32. [online] URL: <http://www.ecologyandsociety.org/vol14/iss2/art32/>
16. Secretaria de Ambiente y Desarrollo Sustentable. 2015. Sistema Nacional de Indicadores de Desarrollo Sustentable. Buenos Aires. Argentina.
17. Sørensen. B. 2011, *Renewable Energy: Its physics, engineering, use, environmental impacts, economy and planning aspects*, Elsevier Science.
18. Yamba, F., M. Kamimoto, L. Maurice, J. Nyboer, K. Urama, T. Weir, Y. Sokona, K. Seyboth, P. Matschoss, S. Kadner, T. Zwickel, P. Eickemeier, G. Hansen. 2011. *Renewable Energy and Climate Change*, 161-208.

4



Cursos electivos de la carrera de Doctorado en Energías Renovables

Aerodinámica y aeroelasticidad de turbinas eólicas

Almacenamiento Electroquímico de Energía

Baterías de ion Litio: Principios y aplicaciones.

Biomasa como fuente alternativa de energía.

Dinámica de fluidos aplicada

Electroquímica Aplicada

Electroquímica de semiconductores

Electrónica de potencia

Energía hidroeléctrica

Energías Renovables y Generación Distribuida

Curso-taller: Estadística, Análisis de Datos y Comunicación de Resultados Estadísticos

Fotoelectroquímica de semiconductores

Mecánica Cuántica

Mecánica de fluidos computacional

Métodos Computacionales en Optimización.

Métodos Mecanocuánticos basados en la teoría del funcional de la densidad electrónica.

Aplicaciones a sistemas nanoestructurados

Microanálisis por sonda de electrones

Microscopía electrónica de barrido

Química Sustentable: Desarrollo de Sistemas Catalíticos y Alternativas para un Desarrollo Sostenible

Termodinámica, transferencias de masa y energía

Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados. Aplicaciones en electrocatálisis

Tecnologías del hidrógeno y pilas de combustible

Tecnología Dish Stirling

Tópicos especiales sobre control de convertidores electrónicos de potencia

Uso racional y eficiente de la energía



Aerodinámica y aeroelasticidad de turbinas eólicas

Carga horaria: 60 horas

Motivación: La energía eólica es, entre las energías renovables, la fuente disponible más viable y más económica como lo demuestra el hecho de que la capacidad instalada se incrementa anualmente a una tasa de más del 24% y desde el año 1996 la generación de energía eléctrica mediante el viento se ha multiplicado por más de 10. Durante el mismo periodo, el tamaño promedio de las turbinas eólicas comerciales se ha incrementado extraordinariamente: desde aproximadamente una potencia de 50 kW y un rotor de 15-20 m de diámetro hasta las máquinas de hoy de 8 MW con un rotor de más de 180 m de diámetro. La economía de escala de las grandes turbinas ha sido el factor principal en la disminución del costo de la energía eólica; los fabricantes de turbinas eólicas están tomando medidas que les permitan disminuir aún más los costos finales del producto. La tendencia hacia el incremento del tamaño de las turbinas eólicas se traduce directamente en el incremento del tamaño de las palas que conforman el rotor. Actualmente se fabrican en serie palas de más de 80 metros de envergadura para máquinas de 8.0 MW y más.

Un aerogenerador obtiene su potencia de entrada convirtiendo la fuerza del viento en un par actuando sobre el eje del rotor. La densidad del aire, del área de barrido del rotor y de la velocidad del viento son los parámetros que determinan cuánta energía del viento está disponible para ser capturada por una turbina eólica. Por otro lado, la cantidad de energía que el rotor "es capaz de capturar" depende exclusivamente de su eficiencia aerodinámica. Por lo tanto, es primordial conocer la eficiencia de las turbinas eólicas y el diseño que determinará dicha eficiencia.

Las turbinas eólicas están expuestas a las condiciones propias de un ambiente altamente inestacionario. Las cargas aerodinámicas actuantes sobre las palas y la torre son consecuentemente de naturaleza inestacionaria y exhiben además una distribución temporal y espacial muy compleja. La predicción precisa y confiable del comportamiento aeroelástico de una turbina es en la actualidad un desafío para la aeroelasticidad.

Objetivos Generales:

- Brindar los elementos teóricos de la aerodinámica y de la dinámica estructural, y su aplicación al campo de la Energía Eólica.
- Entender los conceptos de la física y de la mecánica de fluidos que permiten que una turbina eólica convierta la energía cinética del viento en potencia mecánica.
- Brindar los elementos teóricos de la aeroelasticidad en sistemas estáticos y dinámicos.





- Entender la interacción entre el aire circundante y las estructuras flexibles, y su aplicación al campo de la Energía Eólica.
- Comprender las fuerzas que gobiernan el comportamiento aeroelástico de las turbinas eólicas, los modelos matemáticos, y las ecuaciones fundamentales.

Objetivos Específicos de Aprendizaje: Un estudiante que satisfaga los objetivos generales de este curso, será capaz de:

- Entender los principios básicos de la aerodinámica de las turbinas eólicas.
- Entender los principios básicos de la aeroelasticidad.
- Entender cuáles fenómenos aeroelásticos son importantes en las turbinas eólicas.
- Formular las ecuaciones de movimiento de una turbina eólica.
- Integrar las ecuaciones de movimiento para obtener la historia del estado de la turbina y de las cargas actuantes sobre la misma.
- Explicar la contribución de las diferentes partes componentes de la turbina en la respuesta en el tiempo de la misma.
- Escribir un código de computadora "in house" que permita calcular las cargas aerodinámicas y la respuesta estructural inestacionaria de una turbina eólica.
- Implementar:
 - un modelo dinámico de la estela,
 - un modelo de "yaw",
 - un modelo de pérdida fundado en modelos de aerodinámica inestacionaria para perfiles.
- Verificar que los modelos aerodinámico y estructural están correctamente acoplados.
- Validar el código desarrollado usando resultados numéricos y experimentales disponibles en la literatura.

Programa Analítico:

Unidad I: AERODINÁMICA CLÁSICA

Perfil aerodinámico y teoría de alas. Elementos de teoría de la capa límite y desempeño de perfiles de sustentación. Conceptos generales de pérdida aerodinámica y su modelado. Principio de aerodinámica del rotor. Modelado del disco actuador y teoría de la cantidad de movimiento del elemento de pala. Modelos de vórtices y evolución 3D de la estela. Ejemplos de cálculos típicos. Discusión general.

Unidad II: DINÁMICA ESTRUCTURAL



Desarrollo general de conceptos de elasticidad (tensión, fatiga y sus ecuaciones generales). Dinámica estructural: formulación de los conceptos de equilibrio dinámico y sus ecuaciones fundamentales. Teoría de vigas clásica Euler-Bernoulli. Modelos de aproximación mediante el método de Ritz y mediante elementos finitos. Teoría de segundo orden para el análisis de vigas. Teoría de corte. Modelos dinámicos "multi body".

Unidad III: AEROELASTICIDAD

Interacción fluido estructura. Aeroelasticidad estática (divergencia). Aeroelasticidad dinámica (flutter). Modelos dinámicos lineales y no lineales. Análisis de la estabilidad lineal en rotores y su aplicación a turbinas eólicas.

Metodología de Dictado: Se dictará una clase teórico-práctica semanal (por un período de quince semanas) de 4 horas de duración cada una. Las mismas se desarrollarán en aula, con exposición oral, uso de pizarrón, de computadoras, y de proyector multimedia.

Se fijarán horarios de consulta de acuerdo a las posibilidades del docente responsables del curso y de los estudiantes inscriptos.

Cuarenta (40) de las sesenta (60) horas se dedicarán a clases teórico-prácticas, las que se desarrollarán en aula. Las otras veinte (20) horas se dedicarán a la realización de trabajos prácticos y la confección de programas de computadora. El presente curso no requiere de trabajos de campo, gabinete o laboratorio, visitas o viajes de estudio.

Metodología de Evaluación y Aprobación: La evaluación se realizará mediante la presentación de trabajos prácticos, la confección de programas de computadora (acompañados de respectivos informes) que servirán para implementar los conocimientos adquiridos en el curso y de un examen de final.

Todos los trabajos prácticos, proyectos de computadora e informes deberán ser realizados de manera individual por cada estudiante. Cada trabajo práctico deberá ser entregado en la fecha estipulada por el docente. No se aceptarán trabajos prácticos tardíos.

Para la acreditación del curso, los estudiantes regulares deberán aprobar un examen final individual, presencial, que constará de una serie de preguntas conceptuales y la resolución de problemas.

Trabajos prácticos, programas de computadora/informes: 70%; Examen final: 30%.

Referencias:

1. M. O. L. Hansen, Aerodynamics of Wind Turbines, Third Edition, Routledge, 2 Park Square,



Milton Park, Abingdon, Oxon OX14 4RN, 2015; (ISBN 978-1-138-77507-7).

2. E. Hau, *Wind Turbines: Fundamentals, Technologies, Application, Economics*, Third, translated edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013; (ISBN 978-3-642-27150-2).

Referencias Adicionales:

1. L. Wang, X. Liub, and A. Koliosa, "State of the art in the aeroelasticity of wind turbine blades: Aeroelastic modelling," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volume 64, October 2016, pp. 195-210.

2. P. Zhang and S. Huang, "Review of aeroelasticity for wind turbine: Current status, research focus and future perspectives," *Frontiers in Energy*, December 2011, Volume 5, Issue 4, pp. 419-434.

3. J. N. Sørensen, *General Momentum Theory for Horizontal Axis Wind Turbines*, Springer International Publishing Switzerland 2016; (ISBN 978-3-319-22113-7).

4. P. Brøndsted and R. P. L. Nijssen, *Advances in wind turbine blade design and materials*, Woodhead Publishing Limited, 2013; (ISBN 978-0-85709-426-1).

5. A. P. Schaffarczyk, *Introduction to Wind Turbine Aerodynamics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014; (ISBN 978-3-642-36408-2).

6. D. I. Chortis, *Structural Analysis of Composite Wind Turbine Blades: Nonlinear Mechanics and Finite Element Models with Material Damping*, Springer International Publishing Switzerland 2013; (ISBN 978-3-319-00863-9).

7. T. Burton, D. Sharpe, N. Jenkins, and E. Bossanyi, *Wind Energy Handbook*, John Wiley & Sons, Inc., 605 Third Avenue, New York, NY 10158-0012, USA, 2001; (ISBN 0-471-48997-2).

8. A. M. Kuethe and C.-Yen Chow, *Foundations of Aerodynamics: Bases of Aerodynamic Design*, 5th Edition, John Wiley & Sons, Inc., 1998; (ISBN 0-471-12919-4).

9. J. D. Anderson Jr., *Fundamentals of Aerodynamics*, 6th Edition, McGraw-Hill Education, 2016; (ISBN 978-1259129919).

10. Y. C Fung, *An Introduction to the Theory of Aeroelasticity*, Dover Publications, Inc., 1993; (ISBN 0-486-67871-7).

11. D. H. Hodges and G. A. Pierce, *Introduction to Structural Dynamics and Aeroelasticity*, Second Edition, Cambridge University Press, 2011; (ISBN 978-0-521-19590-4).



Almacenamiento Electroquímico de Energía

Cantidad de horas: 20 hs.

Objetivos: proporcionar a los alumnos conceptos fundamentales y aplicados de los diferentes tipos de sistemas electroquímicos de almacenamiento de energía, sus características de construcción, procesos de funcionamiento, y ventajas y desventajas en aplicaciones a sistemas de interés práctico.

Programa del curso

Unidad I:

Aspectos históricos en el desarrollo de baterías. Sistemas electroquímicos de producción y de almacenamiento de energía eléctrica. Baterías, capacitores y supercapacitores, baterías de flujo redox, y celdas de combustible. Principios de funcionamiento, similitudes y diferencias. Fortalezas, debilidades y aplicaciones específicas de los diferentes tipos de sistemas.

Unidad II:

Almacenamiento de energía en baterías. Baterías primarias y secundarias. Características y especificaciones. Componentes. Rendimiento. Materiales de electrodos y electrolitos. Aspectos termodinámicos y cinéticos. Voltaje, corriente y potencia en las baterías. Capacidad de carga. Eficiencia e irreversibilidad de carga y descarga. Baterías de alta capacidad de carga y de alta potencia. Baterías adecuadas para dispositivos específicos. Aplicaciones en dispositivos portátiles, vehículos eléctricos híbridos y totalmente eléctricos, y sistemas estacionarios.

Unidad III:

Almacenamiento de energía en capacitores y supercapacitores. Fundamentos de los capacitores eléctricos. Supercapacitores (SC) de doble capa electroquímica. Materiales y componentes en SC electroquímicos. Energía y densidad de potencia en SCDC. Características de voltaje y corriente en SC. Pseudocapacitancia de la interfase electrodo-electrolito y pseudocapacitores. Acoplamiento de los SC con otros sistemas de almacenamiento de energías, baterías y celdas de combustible. Aplicaciones de los SC en dispositivos portátiles y vehículos eléctricos.

Unidad IV:

Almacenamiento y conversión de energía en celdas de combustible. Tipos de las celdas de combustible. Características y ventajas de las celdas de combustible. Celdas de membrana de intercambio de protones. Celdas de combustible alcalinas. Celdas de electrolito de óxido sólido.



Celdas de carbonatos fundidos. Catalizadores. Aspectos termodinámicos y cinéticos. Voltaje, corriente, potencia y eficiencia. Balance de agua. Celdas de combustible de hidrógeno y metanol directo. Problemática de la producción y almacenamiento del hidrógeno. Aplicaciones de celdas de combustible en sistemas estacionarios, vehículos y dispositivos electrónicos.

Unidad V:

Almacenamiento de energía en baterías de flujo redox. Sistemas de almacenamiento de energía en gran escala. Procesos de operación. Características de estructuras, materiales de electrodos y electrolitos. Baterías de flujo no acuosas.

Unidad VI:

Consideraciones tecnológicas y socio-económicas del uso de sistemas de almacenamiento electroquímico de energía eléctrica. Relación y adecuación con los sistemas convencionales de producción de energía.

Metodología de trabajo: Clases teóricos-prácticas, con discusión y participación de los alumnos.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias

- 1- The TAB™ Battery Book An In-Depth Guide to Construction, Design, and Use. Michael Root. The McGraw-Hill Companies. Inc. 2011.
- 2- Handbook of batteries. David Linden, Thomas B. Reddy. 3rd ed. The McGraw-Hill Companies, Inc. 2002.
- 3- Understanding batteries. R. Dell, D. A. J. Rand. RSC Paperback. 2001.
- 4- Electrochemical Supercapacitors for Energy Storage and Delivery: Fundamentals and Applications. A. Yu, V. Chabot, J. Zhang. CRC Press. 2017.
- 5- Electrochemical Supercapacitors, B. E. Conway, Kluwer Academic, 1999.
- 6- Proton Exchange Membrane Fuel Cells. Z. Qi. CRC Press 2013.
- Redox Flow Batteries: Fundamentals and Applications. H. Zhang, X. Li, J. Zhang. CRC Press. 2017.
- 8- First-Principles Studies Concerning Optimization of Hydrogen Storage in Nanoporous Reduced Graphite Oxide. C. B. Robledo, M. I. Rojas, O. R. Cámara, E. P. M. Leiva. Int. J. Hydrogen Energy. 39 (2014) 4396-4403.
- 9- An experimental and theoretical approach on the effect of presence of oxygen in milled graphite as lithium storage material. C. B. Robledo, J. E. Thomas, G. L. Luque, E. P. Leiva, O. R. Cámara, D. Barraco, A. Visintin. Electrochim. Acta. 140 (2014) 160-167.



- 10- First-principles studies of lithium storage in reduced graphite oxide. C. B. Robledo, M. Otero, G. Luque, O. Cámara, D. Barraco, E. P. M. Leiva, M. I. Rojas. *Electrochim. Acta.* 140 (2014) 232-237.
- 11- Comparative Study of Different Alkali (Na, Li) Titanate Substrates as Active Materials for Anodes of Lithium Ion Batteries. S. Chauque, C. B. Robledo, E. P. M. Leiva, F. Y. Oliva and O. R. Cámara. *Electrochemical Society Transactions* 63 (1), (2014) 113-128.
- 12- Lithium titanate as anode material for lithium ion batteries: synthesis, post-treatment and its electrochemical response. S. Chauque, F.Y. Oliva, A. Visintin, D. Barraco, E.P.M Leiva and O.R. Cámara. *J. Electroanal. Chem.* 799 (2017) 142-155.



Baterías de ion Litio: Principios y aplicaciones.

Carga horaria: 40 hs

Objetivos:

Este curso plantea dar una introducción a los principios o conceptos básicos para entender el funcionamiento de una batería. Identificar las técnicas electroquímicas de caracterización de materiales para electrodos de baterías. Conocer los diferentes avances científicos y tecnológicos.

Programa analítico:

Unidad I: POTENCIALES Y TERMODINÁMICA DE CELDAS ELECTROQUÍMICAS

Diferencia de potencial electrodo solución. Potencial electroquímico. Potencial de celda.

Unidad II: CINÉTICA DE LAS REACCIONES ELECTROQUÍMICAS

Densidad de corriente y sobrepotencial. Procesos con control activado. Parámetros cinéticos fundamentales. Transferencia de materia en reacciones electroquímicas. Modelo de Butler-Volmer.

Unidad III: DISEÑO DE ELECTRODOS DE ALTA TECNOLOGÍA

Correlaciones fundamentales entre la estructura superficial, composición química y actividad catalítica del material de electrodo. Optimización de los procesos de transferencia de carga y de transferencia de materia.

Unidad IV: DISPOSITIVOS ALMACENADORES DE ENERGÍA ELECTROQUÍMICOS

Celdas de combustible. Supercapacitores. Baterías primarias y secundarias. Tipos de baterías electroquímicas y su evolución histórica.

Unidad V: BATERÍAS DE LITIO: INTRODUCCIÓN.

Principios de funcionamiento de Baterías de litio. Baterías de ion - litio: Estructura y Composición. Diseños de distintos tipos de electrodos, separadores y electrolitos. Técnicas electroquímicas de caracterización: cronoamperometría, cronopotenciometría, voltamperometría cíclica, espectroscopía de impedancia electroquímica, rate - capability. Futuro de las baterías de litio: Baterías de ion - aire, Baterías Li-S, problemas y posibilidades de éxito.

Unidad VI: BATERÍAS DE ION - LITIO : AVANCES CIENTÍFICOS Y TECNOLÓGICOS



Clasificación según su química interna y características de las diferentes familias desde un punto de vista de las aplicaciones reales. Materiales activos (anódicos y catódicos) y sus métodos de síntesis. Seguridad y Criterios de selección de celdas. Fabricación de celdas y baterías. Concepto de BMS (Battery Management Systems) sus funciones y características

Metodología de trabajo:

Clases teórico prácticas de 3 horas de duración donde se presentará y discutirá el temario del programa analítico. Además se realizarán dos trabajos de laboratorio de 4 horas de duración donde se caracterizarán materiales activos comerciales. Se procederá a la preparación de electrodos de trabajo y el correspondiente ensamblado de una celda electroquímica en ambiente controlado para su caracterización mediante ciclados galvanostáticos y voltamperometría cíclica.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

1. A. Bard, L.R. Faulkner. (2000) *Electrochemical Methods, Fundamentals and Applications*. Second Edition. John Wiley & Sons, INC.
2. W. Schmickler, E. Santos. (2010) *Interfacial Electrochemistry*, Springer.
3. J. O'M Bockris, A. K. N. Reddy. (2000) *Modern Electrochemistry*, Second edition, Kluwer Academic Publishers.
4. D. Linden T.B. Reddy. (2002) *Handbook of Batteries*, Third Edition, McGraw-Hill.
5. J-K Park (2010) *Principles and Applications of Lithium Secondary Batteries*, Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA.
6. M. Wakihara, O. Yamamoto (1998), *Lithium Ion Batteries Fundamentals and Performance*, Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA.
7. M. Winter, Dr. R.J. Brodd (2004) *What Are Batteries, Fuel Cells, and Supercapacitors?* Chem. Rev. 104, 4245-4269.
8. M. R. Palacín (2009) *Recent advances in rechargeable battery materials: a chemist's perspective*, Chem. Soc. Rev., 38, 2565-2575 | 2569.
9. C. A. Calderón, C. Ojeda, P. Paredes Olivera, E. M. Patrino, V. A. Macagno. *Interaction of Oxidized Copper Surfaces with Alkanethiols in Organic and Aqueous Solvents. The Mechanism of Cu₂O Reduction*. *J. Phys. Chem. C* 2010, 114, 3945-3957
10. F.P. Cometto, C.A. Calderón, E.M. Euti, D.K. Jacquelin, M.A. Pérez, E.M. Patrino, V.A. Macagno. *Electrochemical study of adlayers of α,ω -alkanedithiols on Au(111): Influence*



- of the forming solution, chain length and treatment with mild reducing agents. *J. Electroanal. Chem.* 2011, 661 (1), 90-99.
11. " F.P. Cometto, C.A. Calderón, M. Berdakin, P. Paredes-Olivera, V.A. Macagno and E.M. Patrino. "Electrochemical Detection of the Thermal Stability of n- Alkanethiolate Monolayers on Au(111). *Electrochimica Acta* 2012, 61, 132-139.
 12. F. P. Cometto, C. A. Calderón, M. Morán, G. Ruano, H. Ascolani, G. Zampieri, P. Paredes-Olivera and E. M. Patrino. Formation, Characterization and Stability of Methyaneselenolate Monolayers on Au(111): An Electrochemical, High Resolution Photoemission Spectroscopy and DFT Study *Langmuir* 2014, 30, 3754-3763.
 13. F.P. Cometto, G. Ruano, F. A. Soria, O.E. Linarez Pérez, C.A. Calderón, P.A. Paredes-Olivera, G. Zampieri, E. M. Patrino, Thermal and Chemical Stability of n-Hexadecanethiol Monolayers on Au (111) in O₂ Environments. *Electrochimica Acta* 2016, 215, 313-325.
 14. Jorge E. Thomas, Rita M. Humana, L. Zubizarreta, Ana Arenillas, J. A. Menéndez, Hugo L. Corso Y Arnaldo Visintin, Ni-Doped Carbons as a Carbon Support for Metal Hydride Electrodes, *Energy & Fuels A.C.S.*, 24 (2010) 3302-3306
 15. R.M. Humana, J.E. Thomas, F. Ruiz, S.G. Real, E.B. Castro, A. Visintin. Electrochemical behavior of metal hydride electrode with different particle size. *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 14966 - 14971.
 16. J.E. Thomas, R.M. Humana, S.G. Real, R.H. Milocco, E.B. Castro. "Design and optimization of single particle electrodes for the kinetic analysis of hydrogen evolution and absorption on hydrogen storage alloys" *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 10165-10171.
 17. F. C. Ruiz; P. Martínez; E. B. Castro; R. Humana; H. Peretti; A. Visintin, Effect of Electrolyte Concentration on the electrochemical properties of an AB5 type alloy, for Ni/MH batteries, *International journal of hydrogen energy* 38 (2013) 240-245.
 18. R. M. Humana, M. G. Ortiz, J. E. Thomas, S. G. Real, M. Sedlarikova, J. Vondrak, A Visintin, Preparation and Characterization of Graphite Anodes For Lithium Ion Batteries. *ECS Trans.* 63 (2014) 91-97.
 19. V. Díaz; R. Humana; E. Teliz; F. Ruiz; E. Castro; R. Faccio; F. Zinola, New response in electrochemical impedance spectroscopy due to the presence of molybdenum on AB5-type alloys", *International journal of hydrogen energy* 40 (2015) 6639-6646.
 20. R. M. Humana, M. G. Ortiz, J. E. Thomas, S. G. Real, M. Sedlarikova, J. Vondrak, A Visintin, Characterization of Anodes For Lithium-Ion Batteries. *Journal of Solid State Electrochemistry* 20 (2015) 1053-1058.



21. T. Kazda, J. Vondrák, M. Sedlarikova, A. Visintin, J. Tichy, R. M. Humana, P. Cudek; Study of the Influence of the Scandium Doping to the Properties of High Voltage $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ Cathode. ECS Transactions, 70 (1) (2015)113-119.
22. R.M Humana, F. C. Ruiz, J.E Thomas, H. A. Peretti, E.B. Castro, A.Visintin, Properties of composites of metal hydride alloys synthesized by mechanical milling, International journal of hydrogen energy. Journal of Solid State Electrochemistry 21 (2017) 153-160.

✍



Biomasa como fuente alternativa de energía.

Carga horaria: 45 h

Objetivo

Analizar los diferentes procesos termoquímicos de aprovechamiento de los recursos biomásicos que pueden utilizarse como precursores de combustibles (bio-oil, bio-carbón y bio-gas) en aplicaciones energéticas.

Programa analítico:

Unidad I- La Energía de la biomasa.

Introducción. Antecedentes. Algunos aspectos técnicos de la energía de la biomasa. Ventajas y desventajas que presenta su uso. Sistemas de aprovechamiento energético de la biomasa.

Unidad II. Diferentes fuentes de residuos biomásicos

Residuos forestales, provenientes de industrias agrícolas y agroalimentarias, ganaderos, urbanos, cultivos energéticos y algas. Evaluación de los recursos de biomasa. Composición y características generales de los diferentes residuos. Situación actual en el mundo y en Argentina.

Unidad III Tratamiento alternativo de residuos derivados de biomasa.

Diferentes técnicas: procesos químicos, termoquímicos y biológicos. Pretratamientos y almacenamiento.

Unidad IV Conversión térmica de biomasa

Técnicas de combustión, pirólisis y gasificación. Fundamentos, descripción de los procesos, estudios de parámetros y condiciones, tipos de producción, control de emisiones. Algunos ejemplos de equipos (industriales y domésticos) en funcionamiento en el país.

Unidad V Generación de biocombustibles

Combustibles gaseosos, líquidos (1G, 2G y 3G) y sólidos a partir de biomasa. Evaluación, caracterización y técnicas de mejoramiento. Usos y aplicaciones de los diferentes productos derivados de biomasa. Toxicidad y biodegradación.

Unidad VI Factores medioambientales y socio-económicos.



El rol de la biomasa en el almacenamiento de carbono y cambio climático. Eficiencia y sustentabilidad de los procesos termoquímicos.

Metodología de trabajo:

- Dictado de 10 clases teóricas de 4 (cuatro) horas de duración cada una y una clase demostrativa experimental de 5 horas de duración.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

- 1- Efficiency and sustainability in the energy and chemical industries. K. Sankaranarayanan, H. J. van der Kooi, J. de Swaan Arons. Ed. S. Lee. CRC Press-Taylor and Francis Group, USA 2010.
- 2- The biomass assesment handbook-Bioenergy for a sustainable environment. Ed. F. rosillo-Calle, 2007, Earthscan, UK.
- 3- Bioenergy and biofuel from biowastes and biomass. S. Khanal, R. Surampalli, T. Zhang, B. Lamsal, R. Tyagi and C. Kao Eds. ASCE Ed. 2010.
- 4- Thermochemical conversion of biomass to liquids fuels and chemicals. M. Crocker Ed. RSC Publishing, UK, 2010.
- 5- T. Kan, V. Strezov, T. Evans, Renewable Sustainable Energy Reviews, 2016, 57, 1126-1140.
- 6- S. Kim, B. Dale; Biomass Bioenergy 2004, 26, 361-375.
- 7- A. Demirbaş; Energy Convers. Managmt. 2001, 42, 1357-1378.
- 8- J. Blin, G. Volle, P. Girard, A. Bridgwater, D. Meier; Fuel, 2007, 86, 2679-2687.
- 9- S. Meyer, B. Glaser, P. Quicker; Environ. Sci. Technol. 2011, 45, 9473-9483.



Dinámica de fluidos aplicada

Carga horaria: 40 hs

Objetivos: desarrollar en el alumno la capacidad para entender los procesos físicos de un fluido en movimiento. El modelado del fluido se hace bajo la suposición de equilibrio termodinámico y por ello se estudia primeramente las leyes que gobiernan dicho equilibrio.

Programa analítico:

UNIDAD I: Fluidos ideales

- 1) Ecuación de continuidad
- 2) Ecuación de Euler
- 3) Hidrostática
- 4) Ecuación de Bernoulli
- 5) Flujos de energía y momento
- 6) Flujo potencial
- 7) Fluidos incompresibles

UNIDAD II: Fluidos viscosos

- 1) Ecuación de Navier-Stokes
- 2) Disipación de energía en un fluido incompresible
- 3) Ley de similaridad
- 4) Aproximación de Stokes
- 5) Estela laminar

UNIDAD IV: Turbulencia

- 1) Estabilidad del flujo estacionario
- 2) Condición de turbulencia
- 3) Inestabilidad de discontinuidades tangenciales
- 4) Desarrollo completo de turbulencia
- 5) Turbulencia local
- 6) Velocidad de correlación
- 7) Región de turbulencia y fenómeno de separación
- 8) Estela turbulenta
- 9) Teorema de Zhukovski





10) Turbulencia isotrópica

Metodología de trabajo: 4 horas de contacto semanales para la teoría y asignación de problemas al final de cada tema.

Metodología de evaluación: La evaluación consta de la aprobación de todas las guías de problemas y de un examen final escrito, en el cual se evaluará la comprensión global del curso. Cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas - prácticas.

Referencias:

1. White, Frank M., and Isla Corfield. *Viscous fluid flow*. Vol. 3. Boston: McGraw-Hill Higher Education, 2011.
2. Kundu, Pijush K., Ira M. Cohen, and D. W. Dowling. *Fluid Mechanics*. 6th edition, Academic Press, 2015.
3. Young, Donald F., et al. *A brief introduction to fluid mechanics*. John Wiley & Sons, 2010.
4. Elger, Donald F., and John A. Roberson. *Engineering fluid mechanics*. Hoboken (NJ): Wiley, 2013.
5. Bradshaw, Peter. *An introduction to turbulence and its measurement: thermodynamics and fluid mechanics series*. Elsevier, 2013.
6. Bruce R. Munson and Alric P. Rothmayer. *Fundamentals of Fluid Mechanics*, Wiley; 7ma edición, 2012.



Electroquímica Aplicada

Carga Horaria: 40 hs.

Objetivos:

Proporcionar a los alumnos conceptos fundamentales y aplicados de los diferentes tipos de procesos electroquímicos, y algunos métodos experimentales para el estudio de procesos de electrodo de interés para el análisis y control de sistemas de interés práctico, particularmente para el almacenamiento de energía.

Programa del curso

PRINCIPIOS y FUNDAMENTOS.

Unidad I:

- Conceptos fundamentales de equilibrio de electrolitos. Interacciones interiónicas: Ley límite de Debye-Hückel. Coeficientes de actividad. Estructura y propiedades de la región interfacial. Termodinámica electroquímica: Potencial Electroquímico. Potenciales eléctricos en la interfaz. Función trabajo. Potencial de celdas galvánicas y de electrodo. Celdas electroquímicas. Procesos faradaicos y no faradaicos.

Unidad II:

- Interfaz metal-solución. Electrodo polarizados y no polarizados. Doble capa eléctrica. Capacidad de la doble capa. Estructura y modelos de la doble capa. Adsorción sobre electrodos metálicos. Adsorción específica. Distribución de potenciales en otras interfaces.

Unidad III

- Cinética de reacciones de electrodo. Polarización electródica: por activación, por caída óhmica y por transporte de masa. Fundamentos de la cinética de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer. Parámetros cinéticos. Teoría de la transferencia de electrones, nociones. Mecanismos de transferencia.

Unidad IV:

- Fenómenos de transporte. Polarización por caída óhmica. Polarización por transporte de masa. Mecanismos de transporte. Sobrepotencial de difusión. Difusión lineal y convectiva. Procesos estacionarios. Relación corriente-sobrepotencial de difusión.

MÉTODOS EXPERIMENTALES PARA EL ESTUDIO DE PROCESOS DE ELECTRODO.



Unidad V:

- Técnicas de pulsos. Pulsos de potencial: Cronoamperometría. Pulsos de corriente: cronopotenciometría. Doble pulso de corriente.

Unidad VI:

- Técnicas de barrido lineal. Voltametría de barrido lineal de potencial. Voltametría cíclica. Adsorción de especies. Sistemas de más de un componente. Reacciones químicas acopladas. Técnicas de barrido lineal de convolución. Ejemplos.

Unidad VII:

- Métodos Periódicos. Impedancia. Espectroscopía de impedancia electroquímica. Circuitos equivalentes de una celda electroquímica. Gráficos de Bode y de Nyquist. Impedancia de sistemas complejos. Ejemplos y aplicaciones.

Metodología de trabajo: Clases teóricos-prácticas, con discusión y participación de los alumnos.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias.

- 1- *Interfacial Electrochemistry*. E. Santos, W. Schmickler. Springer, 2010.
- 2- *Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications* (2da Edición). A. J. Bard, L. R Faulkner. J.Wiley, 2001.
- 3- *Fundamentals of Electrochemistry*. (2nd. Edition). V. S. Bagotsky. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. 2006.
- 4- *Principles of Electrochemistry*. J. Koryta, J. Dvorak, L. Kavan, J. Wiley, 1993.
- 5- *Electrochemistry. Principles, Methods and Applications*. C.M. Brett, A.M. Oliveira Brett. Oxford UP, 1993.
- 6- *Instrumental Methods in Electrochemistry*. R. Greef, R. Peat, L.M. Peter, D. Pletcher, J. Robinson. Ellis Horwood Ltd., 1985.
- 7- *Surface Electrochemistry. A Molecular Level Approach*. J. O'M. Bockris, S.V.M.Khan. Plenum Press, 1993.
- 8- *Modern Electrochemistry I - Ionics*. (2nd Edition). J. O'M. Bockris, A. K. N. Reddy. Kluwer Academic Publishers. New York. 2002.
- 9- *Modern Electrochemistry 2A - Fundamentals of Electrodics*. (2nd Edition). J.O'M. Bockris, A. K. N. Reddy, M. Gamboa-Aldeco. Kluwer Academic Publishers. New York. 2002.



Universidad Nacional de Catamarca
Consejo Superior

10- *Modern Electrochemistry 2B - Electrode Processes in Chemistry, Engineering, Biology, and Environmental Science*. (2nd Edition). J. O'M. Bockris, A. K. N. Reddy. Kluwer Academic Publishers. New York. 2004.

11- *Transient Techniques in Electrochemistry*. D. D. Mac Donald. Plenum Press, 1977.

- Artículos de publicaciones periódicas en el área de la Electroquímica.





Electroquímica de semiconductores

Carga horaria: 40hs

Objetivos: establecer las bases conceptuales de los mecanismos de transferencia de carga heterogénea en interfases semiconductor-electrolito. Paralelamente reconocer las técnicas y metodologías de interés a la caracterización de interfases semiconductor-electrolito. Finalmente extrapolar los conocimientos adquiridos para analizar el comportamiento electroquímico de semiconductores nanoestructurados.

Programa analítico:

Unidad I.: Conceptos y técnicas electroquímicas básicas

- 1.a. Potencial y termodinámica de celdas
- 1.b. Cinética de reacciones en electrodos
- 1.c. Mecanismos de transporte de materia
- 1.d. Métodos de paso de potencial
- 1.e. Métodos de barrido de potencial
- 1.f. Espectroscopía de impedancia electroquímica

Unidad II.: Naturaleza de semiconductores monocristalinos y nanoestructurados

- 2.a. Estructura cristalina y niveles de energía
- 2.b. Densidad de estado y transportadores de carga
- 2.c. Semiconductores intrínsecos y dopados
- 2.d. Excitación y recombinación de transportadores de carga

Unidad III.: Interfase semiconductor-electrolito

- 3.a. La superficie de un semiconductor
- 3.b. La interfase semiconductor-electrolito
- 3.c. Transporte de carga en semiconductores monocristalinos
- 3.d. Transporte de carga en semiconductores nanoestructurados
- 3.e. Transferencia de carga en la interfaz semiconductor-electrolito

Unidad IV: Técnicas electroquímicas específicas

- 4.a. Medidas de recombinación superficial
- 4.b. Medidas de inyección de transportadores minoritarios



4.c. Método de extracción de carga

Unidad V: Semiconductores nanoestructurados: síntesis, caracterización y aplicaciones

5.a. Nanoestructuras de TiO₂

5.b. Nanoestructuras de ZnO

5.c. Nanocristales semiconductores

5.d. Materiales híbridos semiconductores

Metodología de trabajo:

- Dictado de clases teórico-prácticas de 3 (tres) horas de duración cada una.
- Trabajos prácticos de computación para procesamiento de datos experimentales relativos a la unidad 4.
- Problemas, ejercicios y cuestionarios con modalidad de autocorrección, utilizando plataformas virtuales.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

1. Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. 2nd Edition. Allen J. Bard and Larry R. Faulkner. John Wiley and Sons, Inc. Estados Unidos. 2001.
2. Semiconductor Electrochemistry. Rudiger Memming. Wiley VCH. Alemania. 2001.
3. Electrochemistry of Nanomaterials. Gary Hodes Ed. Wiley VCH. Alemania. 2001.
4. Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion. Tetsuo Soga Ed. Elsevier. Holanda. 2006.
5. "Enhancing the adsorption of CdSe quantum dots on TiO₂ nanotubes by tuning the solvent polarity". M.F. Torresan, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. Solar Energy Materials and Solar Cells 164 (2017) 107-113.
6. "Thermal annealing of photoanodes based on CdSe Qdots sensitized TiO₂". M.F. Torresán, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. Solar Energy Materials and Solar Cells 155 (2016) 202-208.
7. "Charge extraction from TiO₂ nanotubes sensitized with CdS quantum dots by SILAR method". C.I. Vázquez, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. IEEE Journal of Photovoltaics 6 (2016) 1515-1521.
8. "Optochemical fiber sensor for Toluidine Blue detection in high turbidity media" V. Benavente Llorente, E.M. Erro, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. Sensors and Actuators B: Chemical 216 (2015) 316-320.



9. "Effect of the electrolyte composition on the response of a TiO₂|CdS-Based Photoanode".
L. Gerbino C.I. Vázquez A.M. Baruzzi R.A. Iglesias. *Electrochimica Acta*.
<http://dx.doi.org/doi:10.1016/j.electacta.2014.06.019>
10. "Fast electrochromic response of ultraporous polyaniline nanofibers". Eustaquio M. Erro,
Ana M. Baruzzi, Rodrigo A. Iglesias. *Polymer* 55 (2014) 2440-2444.
11. "Catalytic EC' reaction at a thin film modified electrode" Leandro Gerbino, Ana M. Baruzzi,
Rodrigo A. Iglesias. *Electrochimica Acta*. 88 (2013) 66-73.



Electrónica de potencia

Carga horaria: 40hs

Objetivos y Justificación:

El objetivo de este curso es brindar las herramientas necesarias para el análisis de circuitos de electrónica de potencia en el marco de las energías renovables. Para ello se recurrirá al estudio de los diferentes elementos que los componen (dispositivos semiconductores de potencia, circuitos de activación, controladores y componentes pasivos como filtros y transformadores). Se dará especial énfasis al análisis de las diferentes topologías para cada aplicación industrial y el estudio de las estrategias que normalmente se utilizan para controlarlas. Las clases teóricas estarán apoyadas por clases de laboratorio donde se hará uso de programas de simulación por computadora. Las competencias y/o habilidades para las que la presente propuesta de curso capacitará a los alumnos son:

- Modelar sistemas que incluyen convertidores electrónicos de potencia.
- Analizar sistemas de control de convertidores electrónicos de potencia.
- Sintetizar sistemas con convertidores electrónicos.
- Determinar los requerimientos de los convertidores en función de la aplicación.

Programa analítico o contenido:

Unidad I: Introducción.

Revisión de conceptos de circuitos eléctricos y magnéticos. Herramientas para la simulación de sistemas electrónicos de potencia.

Unidad II: Dispositivos Electrónicos de potencia:

Diodos de potencia, Transistores Bipolares de Potencia, MOSFET de Potencia, Tiristores, Tiristor GTO, Transistor IGBT. Disparo de los Dispositivos Electrónicos de potencia. Conexión en paralelo y en serie. Componentes pasivos para convertidores: Capacitores, Inductores y transformadores.

Unidad III: Revisión de Convertidores CA - CC.

Rectificadores sin control, Monofásicos, Trifásicos, comparación y análisis de las corrientes y sobretensiones durante el encendido. Rectificadores controlados conmutados por la línea: Monofásicos y Trifásicos. Rectificadores controlados multinivel.

Unidad IV: Convertidores CC - CC:



Convertidor Reductor. Convertidor Elevador. Convertidor Reductor-Elevador. Convertidor Cúk. Semipuente. Puente completo. Comparación de diferentes topologías.

Unidad V: Convertidores CC - CA:

Revisión del Inversor conmutado por la línea. Inversor con conmutación forzada. Técnicas de PWM. Inversor fuente de tensión e inversor fuente de corriente. Inversores multinivel. Convertidores CA - CC con conmutación forzada.

Unidad VI: Convertidores CA - CA:

Variación de tensión de CA. Variación de tensión y frecuencia. Cicloconvertidores. Inversor matricial.

Unidad VII: Convertidores resonantes.

Clasificación de convertidores resonantes. Circuitos resonantes básicos. Convertidores con carga resonante. Convertidores con llaves resonantes. Convertidores con Barra de CC resonante. Convertidores con Barra de CA de alta frecuencia.

Unidad VIII: Aplicaciones de la electrónica de potencia:

fuentes de alimentación, fuentes ininterrumpidas, control de motores eléctricos, rectificadores con corrección de factor de potencia, compensadores estáticos de potencia reactiva, filtros activos de potencia, transmisión de potencia en corriente continua.

Metodología de dictado:

Se dictarán clases teóricas empleando diferentes herramientas didácticas. Se incluirán guías para la resolución de problemas y simulaciones en computadoras digitales.

Metodología de evaluación:

La asistencia deberá ser como mínimo del 80%, a las clases teóricas y prácticas.

Los alumnos deberán realizar la totalidad de los trabajos prácticos que incluyen la resolución de las guías de ejercicios, la implementación de simulaciones en computadoras digitales y los prácticas de laboratorio.

La evaluación final consistirá en la realización de un trabajo individual por parte del alumno, sobre un tema a designar, que incluirá revisión bibliográfica especializada, modelización, simulación y validación experimental. Dicho trabajo será aprobado con una calificación entre 7 (siete) y 10 (diez).



Referencias:

1. Material provisto por los docentes.
1. N. Mohan, T. M. Undeland and W. P. Robbins. "Power electronics: Converters, Applications and Design," John Wiley & Sons, Inc. New York, 3th. Edition, 2003.
2. Erickson R. "Fundamentals of Power Electronics". Kluwer Academic Publisher, 2001.
3. B. K. Bose. Power Electronics and Variable Frequency Drives. Edited by IEEE Press, 1997.
4. W. Leonhard. , "Control of Electrical Drives". Springer-Verlag, 1996.
5. Peter Wood. "Switching Power Converters". Robert E. Krieger Publishing Company, 1984.
6. Richard G. Hoft y Harry A. Owen, Jr. "Proceedings of the IEEE, Special Issue on Power Electronic". Abril 1988.
7. D.M Divan, T. A. Lipo and T. G. Habetler - "PWM Techniques for Voltage Source Inverters", Tutorial Notes, Power Electronics Specialist Conference'90, San Antonio, Texas.
8. Ivo Barbi y Fabiana Pöttker de Souza. Conversores CC-CC Isolados de Alta Freqüência con Comutação Suave. Florianópolis 1999. (<http://www.inep.ufsc.br>).
9. Ivo Barbi. Eletrônica de Potencia. Projectos de fontes chaveadas. Florianópolis 2001. (<http://www.inep.ufsc.br>).
10. Ivo Barbi y Denizar Cruz Martins. Eletrônica de Potencia. Conversores CC-CC Básicos Não Isolados. Florianópolis 2001. (<http://www.inep.ufsc.br>)



Energía hidroeléctrica

Carga horaria: 40hs

Objetivos:

Generar conocimientos en la problemática del proyecto y la ejecución de obras para aprovechamiento de energía hidráulica como energía renovable. Desarrollar los conocimientos en el estudiante relacionados a las centrales hidráulicas. Presentar los problemas de dimensionamiento energético. Plantear los conocimientos de los distintos tipos de turbinas hidráulicas, particularmente las llamadas de pequeña escala. Dar al alumno las herramientas para poder realizar el estudio y proyecto de centrales de aprovechamiento hidráulico.

PROGRAMA ANALÍTICO:

Unidad I: La Hidroelectricidad y el Mercado eléctrico.

Mercado eléctrico. Características generales. Curvas de carga. Producción y consumo de la energía eléctrica. Tipos de centrales de generación. Costo de las centrales. Función de las centrales de generación en el sistema. Potencia garantizada. Valoración de los proyectos hidroeléctricos. Equivalencia energética.

Unidad II: Presas

Clasificación y selección de presas. Presas de tierra: características, fundaciones, terraplenes, proyecto, ejemplos. Presas de escollera: características, fundación, cuerpo de la presa, proyecto, ejemplos. Presas de gravedad, presas en arco y aligeradas: características, solicitaciones, estabilidad, fundaciones, proyecto, ejemplos. Seguridad. Auscultación.

Unidad III: Obras anexas a las presas

Vertederos. Estructuras de disipación de energía. Obras de toma. Obras de desvío. Ejemplos prácticos.

Aprovechamientos Hidroeléctricos: Centrales hidroeléctricas. Casa de máquinas. Conducciones. Dispositivos de apertura, cierre y regulación. Pequeños aprovechamientos.

Unidad IV: Centrales y Máquinas Hidráulicas.

Conceptos básicos. Conceptos básicos. Introducción. Potencial bruto. Esquemas básicos. Potencia y energía efectiva. Variabilidad de caudales. Centrales subterráneas. Centrales reversibles. Captaciones. Elementos de cierre y protección. Centrales hidroeléctricas en aprovechamientos de uso múltiple. Componentes de un aprovechamiento hidroeléctrico. Definiciones. Energía





hidroeléctrica y medio ambiente.

Unidad V: Turbomáquinas y Máquinas Hidráulicas

Principios teóricos. Bombas centrífugas. Bombas axiales. Turbinas de reacción de flujo radial. Turbinas de reacción de flujo axial. Turbinas/bombas reversibles. Turbinas de impulso. Regulación. Turbinas Francis, Kaplan, Pelton, Michell -Banki (Ossberger), microturbinas. Alternadores. Centrales hidráulicas y minicentrales

Unidad VI: Aprovechamiento integral de una cuenca.

Aprovechamiento integral de una cuenca. Información de partida. Potencial energético. Aprovechamiento del potencial energético. Estudio de los embalses. Modelos de simulación. Construcción escalonada

Unidad VII: Dimensionamiento de los aprovechamientos hidroeléctricos.

Dimensionamiento de los aprovechamientos hidroeléctricos. Proceso de definición de un aprovechamiento hidroeléctrico. Criterios de evaluación. Criterios de dimensionamiento. Centrales de paso. Centrales con regulación. Optimización de la conducción. Evaluación de proyectos. Influencia del mercado. Estudio financiero.

Unidad VIII: Consideraciones Ambientales

Evaluación de Impacto Ambiental (EIA). Análisis medioambiental del proyecto hidráulico. Situación de base. Identificación de alteraciones. Predicción y evaluación del impacto. Medidas preventivas y de mitigación. Seguimiento.

LISTADO DE ACTIVIDADES PRÁCTICAS

Las actividades prácticas se realizan en forma individual.

TPN° 1: Hidrología de presas.

TPN° 2: Presas de materiales sueltos.

TPN° 3: Obras anexas a las presas.

TPN° 4: Aprovechamientos hidroeléctricos.

Metodología de Trabajo

El dictado de clases es teórico-práctico. La metodología de trabajo en la cátedra incluye tres ejes de trabajo: la clase teórica, el desarrollo de trabajos prácticos y las visitas técnicas. En cada caso se desarrollan las siguientes técnicas:

- Clase teórica



- Exposición didáctica sobre material a leer o leído por los alumnos.
 - Comentarios de los alumnos sobre el material leído.
 - Planteo de los alumnos sobre casos de su interés.
 - Clases de ejercicios prácticos
 - Presentación del problema a resolver, su vínculo con la teoría y las técnicas de abordaje.
 - Planteo inicial de resolución.
 - Discusión de los resultados.
 - Visitas a laboratorio y técnicas
 - Observación y análisis del caso.
 - Preparación de monografía.
- Discusión plenaria.

Metodología de evaluación:

La evaluación estará constituida por un promedio de las notas asignadas a dos parciales teórico-práctico, un coloquio integrador y los trabajos prácticos individuales.

Las notas de los trabajos prácticos individuales tendrán en cuenta: el desarrollo teórico aplicado, la resolución y la puntualidad en la entrega.

La evaluación de los parciales tendrá en cuenta: el desarrollo teórico aplicado, el uso de herramientas disponibles y los resultados alcanzados.

Referencias

1. Cuestas Diego, Luis y Vallarino, (2000). Aprovechamientos Hidroeléctricos. Tomo I. Ed. Colegio de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. España.
2. Cuestas Diego, Luis. y Vallarino, (2000) Aprovechamientos Hidroeléctricos. Tomo II. Ed. Colegio de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. España.
3. Ingeniería, Estudios y Proyectos NIP, S.A. Ente Vasco de la Energía (EVE). División de Investigación y Recursos (1995). Minihidráulica en el País Vasco. Editorial Ente Vasco de la Energía (EVE). División de Investigación y Recursos. I.S.B.N.: 84-8129-032-7. 1ª Edición. Boilbao. España.
4. Intermediate Technology Development Group, ITDG – Perú (1995). Manual de Mini y Microcentrales Hidráulicas. ISBN: 1 85339 278 2. Lima. Perú.
5. Mataix Plana, Claudio y Antonio, (2009). Turbomáquinas hidráulicas: Turbinas hidráulicas, bombas, ventiladores., Ed. Arenas Alonso. Universidad Pontificia Comillas de Madrid. ISBN: 8484682528 ISBN-13: 9788484682523. España.
6. Polo Encinas, M. (1976). Turbomáquinas Hidráulicas. Ed. Limusa. Méjico.
7. Secretaría de Estado para las Políticas del Agua y el Medio Ambiente. Ministerio de Obras



- Públicas, Transportes y Medio Ambiente (1995). Guías Metodológicas para la Elaboración de Estudios de Impacto Ambiental. 2. Grandes Presas. Ediciones Centro de Publicaciones Secretaría General Técnica Ministerio de Obras Públicas, Transportes y Medio Ambiente. Segunda Reimpresión. Madrid.
8. Suarez Villar, L. M. (1982) Ingeniería de Presas. Obras de Toma, Descarga y Desviación. Ediciones Vega. Venezuela.
 9. U.S.D.I., Bureau of Reclamation (1970). Proyecto de Presas Pequeñas. Editorial Dossat. Madrid.
 10. Vallarino, E., (2001). Tratado Básico de Presas. Ed. Colegio de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. España.

(Handwritten mark)



Energías Renovables y Generación Distribuida

Carga horaria: 20hs

Justificación

Este curso aborda la problemática vigente a nivel nacional e internacional sobre el interés y la necesidad de desarrollar las fuentes de Energías Renovables para mitigar algunos aspectos básicos de los problemas ambientales y energéticos existentes. Un área central en este sentido es el de la energía eléctrica, particularmente bajo el concepto de Generación Distribuida (GD) mediante Energías Renovables No Convencionales (ERNC).

La GD mediante ERNC constituye para los ciudadanos, asociaciones y empresas, la oportunidad de ser parte de la Transición Energética que reclama el planeta y brindar la posibilidad de cambiar el origen de las formas aprovechables de energía de las tradicionales hacia las Renovables. Es una herramienta muy importante para la implementación de políticas de gestión en la generación y el consumo de las energías, contribuyendo a la democratización de los sistemas energéticos y comprometiendo la participación social en estos procesos.

Objetivos

Generales:

Presentar una visión general sobre los aspectos técnicos, económicos, estado de desarrollo y perspectivas futuras de la Generación Distribuida mediante Energías Renovables No Convencionales.

Específicos:

- 1.- Establecer un marco general asociando los conceptos de Cambio Climático - Energías y Desarrollo Sustentable - Generación Eléctrica Distribuida - Energías Renovables No Convencionales.
- 2.- Conocer la evolución reciente del concepto de GD, su estado actual de Desarrollo y perspectivas futuras.
- 3.- Fundamentos técnicos de la GD mediante ERNC, ventajas y desventajas, problemas operativos y de gestión.
- 4.- Presentar aspectos destacados de la Normativa Internacional en lo técnico y en los procesos de legislación en implantación de la GD

Programa Analítico:

Unidad I: INTRODUCCIÓN



Cambio climático: Huella de Carbono y Huella Ecológica. Protocolo de Kyoto y Mercados de Carbono. Balance energético argentino y Mercado eléctrico argentino. Inventario de gases de efecto invernadero en argentina.

Energía: Definiciones. EROI de combustibles. Extensiones de EROI. Las Políticas de desarrollo de energías alternativas. Demanda de energía y desarrollo sustentable.

Generación Distribuida y Energías Renovables: Aspectos generales de la planificación y operación clásica de los Sistemas Eléctricos (SE). Generalidades sobre el impacto de la Generación Distribuida en los SE. Tecnologías de conversión. Los sistemas de generación eléctrica e impacto ambiental. Potenciales y barreras para las Energías Renovables.

Unidad II: TECNOLOGÍAS Y PROCESOS DE CONVERSIÓN

Generación Fotovoltaica:

Introducción. La celda fotovoltaica: Modelado. Parámetros en condiciones estándares. TONC. Curvas I-V y P-V, El modelado en función de la radiación y de la temperatura. Maximum Power Point. Central fotovoltaica. Tecnologías fotovoltaicas. Estado actual de desarrollo, potencias instaladas, energías generadas, evolución de precios.

Geometría solar. Modelos para estimación de radiación solar. Superficies horizontales y superficies inclinadas. Sombras. La radiación solar extraterrestre. Estimación de radiación en un lugar. Radiación directa, difusa y albedo. Sistemas de seguimiento. Procedimiento para la estimación de la disponibilidad energética.

Generación Eólica:

Introducción. Principios básicos de la conversión de la energía eólica: potencia y torque, coeficientes de potencia y coeficiente de torque, Tip Speed Ratio (λ). Clasificación de las turbinas eólicas. Punto de máxima potencia. Curvas características de turbinas de velocidad variable.

Evolución y estado actual de los aprovechamientos eólicos. Análisis de datos de viento y estimación del recurso. Uso directo de datos. Análisis estadístico de datos de viento. Distribución probabilística del viento. Distribución de Rayleigh. Distribución de Weibull. Métodos de determinación de los coeficientes de Weibull. Cálculo de productividad usando máquina ideal. Cálculo de productividad con turbina real usando distribución de Weibull. Aspectos generales del funcionamiento de los aerogeneradores.

Otras Fuentes Alternativas:

Energía de las mareas: Energía potencial de las mareas, ciclos, estado de desarrollo. Energía de las olas: aprovechamientos de la energía de las olas (hidráulicos, neumáticos) y estado de desarrollo. Energía de las corrientes marítimas: Formas de aprovechamiento, estado de desarrollo. Energía térmica-marina.



Energía Geotérmica: Naturaleza de los recursos geotérmicos, yacimientos geotérmicos, principios de aplicación, estado de desarrollo.

Bioenergías: Biomasa residual seca y cultivos energéticos. Biocombustibles. Residuos sólidos urbanos.

Unidad III: CONVERSIÓN DE LA ENERGÍA ELÉCTRICA

El generador síncrono: Aspectos básicos de funcionamiento. Características operativas. Estabilidad de la máquina síncrona. Cortocircuito. Reconexión.

El generador de inducción: Aspectos básicos de funcionamiento de la máquina asíncrona. Características operativas. Estabilidad de la máquina asíncrona. Cortocircuito. Reconexión.

Inversores y convertidores estáticos: Conversión dc-dc, ac-dc, dc-ac y ac-ac. Inversores PWM. Evolución y estado actual. Rendimientos. Inversores aplicados a la interconexión de sistemas fotovoltaicos. Bases de selección.

Máquinas para la conversión eólica-eléctrica: Generador de Inducción, Generador de Inducción con rotor bobinado, Generador de inducción doblemente alimentado (DFIG), Tecnologías Full-Converter (con máquinas síncronas y asíncronas). Curvas de carga de las distintas tecnologías de conversión.

Unidad IV: IMPACTO DE LA GENERACIÓN DISTRIBUIDA SOBRE LOS SISTEMAS DE DISTRIBUCIÓN

Generalidades. Potencias relativas y localización del GD. Regulación de tensión. Flujo de potencia. Pérdidas. Corrientes nominales y capacidad de ruptura. Seguridad. Condiciones de falta. Compatibilidad de la puesta a tierra. Confiabilidad. Desequilibrio. Armónicos. Huecos de tensión. Flicker.

Unidad V: CALIDAD DE POTENCIA Y GENERACIÓN DISTRIBUIDA

IEC 61400-21. Armónicas, interarmónicas y componentes de alta frecuencia. Huecos de tensión. Potencia activa y reactiva. Fluctuaciones de tensión: Operación continua y de maniobra (flicker de escalón).

Unidad VI: ESTÁNDARES Y REQUERIMIENTOS TÉCNICOS DE INTERCONEXIÓN - LEGISLACIÓN Y REGULACIÓN DE LOS SISTEMAS DE GENERACIÓN DISTRIBUIDA

IEEE 1547. Regulación de tensión. Integración de puesta a tierra y sincronización. Coordinación del re-cierre. Inyección de dc. Flicker y armónicos. Fault Ride Through (FRT). Aspectos generales. Estado actual y revisión: Canadá, Reino Unido, USA, Alemania, Dinamarca, etc. DINAMARCA TF 3.2.5 (Regulación técnica para eólicas mayores de 11kW, 25kW, 1,5MW). Tolerancias a



desviaciones de tensión y frecuencia, condiciones normales y anormales. Flicker y armónicos. Control y monitoreo.

Sistemas de intercambio o comercialización de energía: Net metering, Net Billing, Feed in Tariff.

La Generación Distribuida en Argentina: Legislación, Estado de desarrollo y perspectivas.

Metodología de dictado:

Se realizarán clases teóricas..

Material de clase: Se entregan las presentaciones empleadas en el dictado de las clases y referencias bibliográficas.

Metodología de evaluación:

Sobre el final del curso se realiza un trabajo monográfico individual sugerido por el alumno y acordado con el docente. Sobre tal trabajo se efectúa la evaluación final.

Referencias

1. Renewable Energy: Its physics, engineering, use, environmental impacts, economy and planning aspects, Bent Sørensen, Elsevier Science, 2004.
2. Renewable Energy Snapshots 2012, Joint Research Centre of the European Commission, 2012.
3. Special Report on Renewable Energy Sources and Climate Change Mitigation, Intergovernmental Panel on Climate Change, 2011.
4. Photovoltaic Solar Energy: Development and Current Research, European Commission, 2009.
5. 2009 Wind Technologies Market Report, U.S. Department of Energy, Energy Efficiency & Renewable Energy, 2010.
6. Wind Energy: Fundamentals, Resource Analysis and Economics, Sathyajith Mathew, Springer, 2006.
7. Solar Electric Power Generation, Stefan C.W. Krauter, Springer 2006.
8. Micro Cogeneration: Towards Decentralized Energy Systems, Martin Pehnt, Martin Cames, Corinna Fischer, Barbara Praetorius, Lambert Schneider, Katja Schumacher, Jan-Peter Voß, Springer, 2006.
9. Wind and Solar Power Systems, Mukund R. Patel, CRC Press, 1999.
10. Wind Energy Handbook, T Burton, D. Sharpe, N. Jenkins & E. Bossanyi, JOHN WILEY & SONS, LTD, 2001.
11. "IEEE Standard for Interconnecting Distributed Resources with Electric Power Systems", IEEE 1547.



12. "Technical regulation 3.2.5 for wind power plants with a power output greater than 11 kW", Energinet, Dinamarca.
13. Distributed Generation: The Power Paradigm for the New Millennium, Ann-Marie Borbely & Jan F. Kreider, CRC Press, 2001.
14. Integrating Distributed Resources into Electric Utility Distribution Systems, EPRI 2001.

[Handwritten mark]



Curso-taller: Estadística, Análisis de Datos y Comunicación de Resultados Estadísticos

Carga horaria: 60 horas.

Objetivos:

- Ofrecer a los participantes un espacio para la presentación de casos o problemas vinculados al área de energías renovables que demanden análisis estadístico de datos.
- Implementar el análisis de datos en base al uso de software estadístico.
- Familiarizar al participante con la comunicación de resultados estadísticos.

Contenidos

En este curso-taller en una primer parte se dictarán clases teórico-prácticas y luego en la segunda parte se abordarán problemas reales planteados por los participantes para los cuales hayan recolectados datos. Luego de definir la estrategia de análisis se revisarán los contenidos teóricos estadísticos necesarios para su abordaje. Consecuentemente, los contenidos del curso-taller serán función de las problemáticas presentadas. Adicionalmente, se presentarán pautas para la comunicación efectiva de resultados estadísticos así como para la redacción de análisis y resultados estadísticos en trabajos científicos.

Programa analítico:

Unidad I: Análisis Exploratorio

Estadísticos Descriptivos. Medidas de Posición: media, moda, mediana, cuantiles. Medidas de Dispersión: Varianza, Coeficientes de Variación. Estimación e intervalos de confianza. Prueba de hipótesis. Interpretación.

Tablas de Frecuencias y Pruebas de Asociación

Gráficos univariados y multivariados. Diagrama de Dispersión, Gráficos de barra, Gráficos Box-Plot, Diagrama de punto. Gráfico de estrellas.

Unidad II: El modelo lineal de clasificación

Principios del diseño experimental. Experimentos unifactoriales. Pruebas de comparaciones múltiples. Descomposición de sumas de cuadrados mediante contrastes ortogonales. Valoración de supuestos. Experimentos con estructura factorial de tratamientos. Factores cruzados y anidados. Diseños factoriales. Número de repeticiones necesarias para tener la potencia deseada.



Experimentos con estructura de unidades experimentales (UE). Diseños completamente aleatorizados, diseños en bloques. Combinación de estructura factoriales de tratamientos con estructuras de UE.

Modelos que incluyen covariables: Análisis de la covarianza.

Unidad III: El modelo lineal de regresión

El modelo lineal de regresión. Regresión lineal simple. Coeficientes de regresión. Estimación e intervalos de confianza. Prueba de hipótesis. Aplicaciones. Generación de datos bajo un modelo de regresión con parámetros conocidos. Valores predichos, bandas de confianza y predicción. Análisis de residuos. Adecuación del modelo.

El modelo de regresión lineal múltiple. Estimación. Interpretación de los coeficientes de regresión múltiple. Pruebas de hipótesis. Modelo de regresión polinómica.

Diagnóstico en regresión lineal múltiple. Leverage, distancia de Cook, residuos estudentizados y externamente estudentizados. Residuos parciales.

Unidad IV: Análisis Multivariado

Datos multivariados. Ejemplos de motivación. Medidas de distancia estadística. Análisis de componentes principales. Análisis de Conglom

Metodología del curso:

Modalidad teórico-práctico. Clases teórico prácticas distribuidas en tres encuentros de dos días.

Modalidad de evaluación: Examen final escrito

Requerimientos: Cada asistente al curso deberá traer una notebook con el software InfoStat, R y la conexión entre ambos.

Referencias:

1. Bangdiwala S. I. (2001). Training of statisticians worldwide to collaborate as co-investigators within country clinical epidemiology units: The experience of the International Clinical Epidemiology Network (INCLLEN). In Batanero, C. (Ed.), Training researchers in the use of statistics (pp. 265-275). Granada: International Association for Statistical Education and International Statistical Institute.



2. Jolliffe F. (2001) Learning from experience. In Batanero, C. (Ed.), Training researchers in the use of statistics (pp. 355-370). Granada: International Association for Statistical Education and International Statistical Institute.
3. Kuel, R. 2001. Diseño de Experimentos. Principios estadísticos de diseño y análisis de investigación. Segunda Edición. Ed. Thompson. ISBN 0-534-36834-4. pp 665.
4. West, T. B., Welch, K. B., Galecki, A. T. 2015. Linear mixed models: A practical guide using statistical software (2nd ed.). Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 440 pp.

Software:

1. Se utilizará el software estadístico InfoStat (Di Rienzo et al., 2017) y su conexión con el software R (R Core Team, 2017).
2. Di Rienzo J.A., Casanoves F., Balzarini M.G., Gonzalez L., Tablada M., Robledo C.W. InfoStat versión 2017. Grupo InfoStat, FCA, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina. URL <http://www.infostat.com.ar>
3. R Core Team, 2017. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <http://www.R-project.org/>.
4. Documentación de InfoStat:
5. Balzarini M.G., Gonzalez L., Tablada M., Casanoves F., Di Rienzo J.A., Robledo C.W. 2008. Infostat. Manual del Usuario, Editorial Brujas, Córdoba, Argentina.

dt



Fotoelectroquímica de semiconductores

Carga horaria: 40hs

Objetivos: estudiar los conceptos generales relativos a procesos de transferencia de carga heterogénea que ocurren en interfases semiconductor-electrolito cuando éstos son asistidos por irradiación (UV-visible). Reconocer metodologías espectroelectroquímicas y fotoelectroquímicas que permitan estudiar cualitativa y cuantitativamente estos procesos. Analizar sistemas experimentales y pequeños prototipos de celdas solares que utilicen los fenómenos estudiados para convertir energía solar en energía eléctrica.

Programa analítico:

Unidad I: Transferencia de carga fotoinducida en la interfaz semiconductor-electrolito

Unidad II: Técnicas fotoelectroquímicas y espectroelectroquímicas

- 2.a. Propiedades ópticas superficiales (reflectancia, fluorescencia, absorbancia, elipsometría espectral)
- 2.b. Técnicas fotoelectroquímicas convencionales (fotocorrientes, espectros de fotocorrientes, técnicas acopladas de pulsos de irradiación y electroquímicos, etc.)
- 2.c. Espectroscopía de fotovoltaje modulado por irradiación (IMVS)
- 2.d. Espectroscopía de fotocorriente modulada por irradiación (IMPS)

Unidad III: Celdas solares basadas en semiconductores nanoestructurados

- 3.a. Fundamentos de celdas solares nanoestructuradas
- 3.b. Nanoarquitecturas semiconductoras típicas
- 3.c. Celdas solares orgánicas
- 3.d. Celdas solares sensibilizadas con colorantes
- 3.e. Celdas solares sensibilizadas con puntos cuánticos
- 3.f. Otras tecnologías similares

Unidad IV: Aprovechamiento de energía solar en Argentina y en el mundo

Metodología de trabajo:

- Dictado de clases teórico-prácticas de 3 (tres) horas de duración cada una.



- Trabajos prácticos de computación para procesamiento de datos experimentales relativos al capítulo 2.
- La unidad IV será discutido en modalidad de debate, posterior a presentaciones realizadas por los estudiantes alrededor de la temática, utilizando bibliografía brindada para tal efecto.
- Problemas, ejercicios y cuestionarios con modalidad de autocorrección, utilizando plataformas virtuales.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Requisitos: PARA ASISTIR Y APROBAR ESTE CURSO DEBE HABERSE APROBADO PREVIAMENTE EL CURSO "ELECTROQUÍMICA DE SEMICONDUCTORES" U OTRO DE SIMILARES CARACTERÍSTICAS

Referencias:

1. Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. 2nd Edition. Allen J. Bard and Larry R. Faulkner. John Wiley and Sons, Inc. Estados Unidos. 2001.
2. Semiconductor Electrochemistry. Rudiger Memming. Wiley VCH. Alemania. 2001.
3. Electrochemistry of Nanomaterials. Gary Hodes Ed. Wiley VCH. Alemania. 2001.
4. Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion. Tetsuo Soga Ed. Elsevier. Holanda. 2006.
5. Principles and Applications of Semiconductor Photoelectrochemistry. Nathan S. Lewis et al. In Progress in Inorganic Chemistry, vol. 41. Kenneth Karlin Ed. John Wiley and Sons, Inc. 1994.
6. "Enhancing the adsorption of CdSe quantum dots on TiO₂ nanotubes by tuning the solvent polarity". M.F. Torresan, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. Solar Energy Materials and Solar Cells 164 (2017) 107-113.
7. "Thermal annealing of photoanodes based on CdSe Qdots sensitized TiO₂". M.F. Torresán, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. Solar Energy Materials and Solar Cells 155 (2016) 202-208.
8. "Charge extraction from TiO₂ nanotubes sensitized with CdS quantum dots by SILAR method". C.I. Vázquez, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. IEEE Journal of Photovoltaics 6 (2016) 1515-1521.
9. "Optochemical fiber sensor for Toluidine Blue detection in high turbidity media" V. Benavente Llorente, E.M. Erro, A.M. Baruzzi, R.A. Iglesias. Sensors and Actuators B: Chemical 216 (2015) 316-320.



10. "Effect of the electrolyte composition on the response of a TiO₂|CdS-Based Photoanode".
L. Gerbino C.I. Vázquez A.M. Baruzzi R.A. Iglesias. *Electrochimica Acta*.
<http://dx.doi.org/doi:10.1016/j.electacta.2014.06.019>
11. "Fast electrochromic response of ultraporous polyaniline nanofibers". Eustaquio M. Erro,
Ana M. Baruzzi, Rodrigo A. Iglesias. *Polymer* 55 (2014) 2440-2444.
12. "Catalytic EC' reaction at a thin film modified electrode" Leandro Gerbino, Ana M. Baruzzi,
Rodrigo A. Iglesias. *Electrochimica Acta*. 88 (2013) 66-73.

[Handwritten signature]



Mecánica Cuántica

Carga horaria: 50hs

Objetivos:

Proveer una serie de herramientas teóricas que faciliten el acercamiento del asistente a la bibliografía contemporánea sobre mecánica cuántica de sistemas en química física y materia condensada aplicada sobre campos de generación y almacenamiento de energía.

Programa analítico:

Unidad I: El álgebra de la mecánica cuántica:

Espacio de Hilbert, Espacio dual, Operadores, Productor exterior, Operador identidad, Autovalores y autovectores, Representación de operadores, Funciones de operadores, Observables, Medición, Función de onda, Valor de expectación o valor esperado, Observables compatibles. ☐

Unidad II: Dinámica cuántica:

La ecuación de Schrödinger, Dinámica del sistema de dos niveles: Oscilaciones de Rabi, El operador evolución, Valor de expectación en función del tiempo, Propiedades del operador evolución, Ecuación de Schroedinger para el operador evolución, Serie de Dyson, Exponenciales ordenadas en el tiempo, Figura de Heisenberg, Figura de Interacción, Representación diagramática de la serie de Dyson, Teorema de Ehrenfest. ☐

Unidad III: Matriz densidad:

El operador densidad, Estados puros y ensambles, Valores de expectación para ensambles, Propiedades del operador densidad, Ecuación de movimiento para el operador densidad, Entropía de Von Neumann, Matriz Densidad de Equilibrio, Operador densidad para ensamble canónico y microcanónico, Función de partición. ☐

Unidad IV: Sistemas compuestos por subsistemas:

Producto tensorial, Postulado para sistemas compuestos, Operadores en el espacio producto, Matrices densidad para sistemas compuestos, Producto escalar parcial, Matriz densidad para subsistemas no correlacionados, Modelo de Von Neumann del proceso de medición, Matriz densidad de un sistema en un medio ambiente La paradoja del gato de Schrödinger, Teoría de la Decoherencia



Unidad V: Sistemas de partículas: Sistemas de partículas independientes e interactuantes en mecánica cuántica, Nociones de sus propiedades generales y formalismos de estudio, Nociones de segunda cuantización, Sistemas de bosones y fermiones independientes, Formalismos de campo medio: Hartree, Hartree-Fock, DFT, etc.

Unidad VI: Teoría de respuesta lineal: Transformada de Fourier del operador evolución, acoplamiento a un continuo, Teoría de respuesta lineal, Función de respuesta y su expresión en términos de funciones de correlación cuánticas, Polarizabilidad dependiente del tiempo, estructura analítica de la función de respuesta, Respuesta a una señal monocromática, respuesta de un sistema acoplado a un continuo, Ensanchamiento homogéneo e inhomogéneo de líneas espectrales. ☐

Metodología de trabajo: Dictado de clases teórico prácticas de 3 horas de duración cada una.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

1. C. G. Sánchez, "Notas de dinámica cuántica" (2015). ☐
2. J. J. Sakurai, "Modern Quantum Mechanics", Revised Edition, Addison-Wesley ☐(1994). ☐
3. S. Mukamel, "Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy", Oxford University ☐Press, (1999). ☐
4. A. Nitzan, "Chemical Dynamics in Condensed Phases", Oxford University Press, ☐(2004). ☐
5. H. Bruus y K. Flensberg, "Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter ☐Physics, An Introduction", Oxford University Press (2004). ☐
6. G. Giuliani y G. Vignale, "Quantum Theory of the Electron Liquid", Oxford ☐University Press (2005). ☐
1. M. Schlosshauer, Decoherence and the Quantum-to-Classical Transition, Springer (2007).



Mecánica de fluidos computacional

Carga horaria: 40hs

Objetivos: Conocer los fundamentos teóricos y prácticos del método de los elementos finitos aplicado a la dinámica de fluidos. Identificar los principales aspectos teóricos y computacionales. Conocer los fundamentos de las aproximaciones numéricas a la dinámica de fluidos: las ecuaciones, las discretizaciones espaciales y temporales y los aspectos matemáticos más relevantes como la estabilización de la convección y de la incompresibilidad, como así también las correctas condiciones de contorno y los métodos más adecuados para la solución de los diversos problemas de dinámica de fluidos.

El curso cubre tanto los aspectos teóricos esenciales así como la aplicación práctica de éstos. En particular técnicas específicas para las ecuaciones de Euler y de Navier Stokes.

Programa de la materia:

Unidad I: Ecuaciones de conservación.

- 1.1 Descripción de las ecuaciones de movimiento de fluidos.
- 1.2 Forma débil.
- 1.3 Discretización.
- 1.4 Integración numérica.
- 1.5 Matrices elementales y ensamblado.

Unidad II: Ecuación de convección-difusión.

- 2.1 Análisis de la ecuación de convección-difusión 1D.
- 2.2 Estabilización
- 2.3 Formulaciones estabilizadas consistentes.
- 2.4 Solución de una ecuación de 1D estacionaria.
- 2.5 Integración temporal de la ecuación transitoria.
- 2.6 Solución de una ecuación de 1D transitoria.
- 2.7 Solución de la ecuación en 2D.

Unidad III: Flujo compresible.

- 3.1 Propiedades básicas de las ecuaciones de Euler.
- 3.2 Condiciones de contorno.
- 3.3 Ecuaciones escalares hiperbólicas no lineales: soluciones débiles.



- 3.4 Discretización en tiempo y espacio (Navier Stokes).
- 3.5 Estabilización y captura de choques.
- 3.6 Ejemplos.

Unidad IV: Flujo viscoso incompresible.

- 4.1 Propiedades básicas de las ecuaciones de Navier Stokes
- 4.2 Condición inf-sup.
- 4.3 Discretización temporal y espacial.
- 4.4 Condiciones de contorno.
- 4.5 Métodos de pasos fraccionado y penalización.
- 4.6 Estabilización de términos convectivos y de incompresibilidad.
- 4.7 Ejemplos.

Unidad V: Modelación de la turbulencia.

- 5.1 Ecuaciones promediadas de Navier Stokes.
- 5.2 Características de los flujos turbulentos.
- 5.3 Comparación: flujo laminar y flujo turbulento.
- 5.4 Modelos escalares, de 1 y 2 ecuaciones.
- 5.5 Ejemplos.

Unidad VI: Pre y post proceso

- 6.1 limpieza de CAD.
- 6.2 Conceptos básicos de generación de mallas.
- 6.3 Nociones de calidad de malla.
- 6.4 Herramientas de post-proceso.

Metodología de trabajo: Clases teóricas-prácticas, con discusión y participación de los alumnos.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

1. Donea, J., Huerta, A., Finite Element Methods for Flow Problems, Wiley, 2003
2. Anderson, John D. Computational Fluid Dynamics: The basics with applications. New York: McGraw-Hill, 1995. ISBN 0070016852.



Universidad Nacional de Catamarca
Consejo Superior

3. W. Malalasekera, H. K. Versteeg, An Introduction to Computational Fluid Dynamics. Longman Scientific & Technical, 1995
4. O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor and P. Nithiarasu, The Finite Element Method for Fluid Dynamics (Seventh Edition), Elsevier 2014.



Métodos Computacionales en Optimización.

Carga horaria: 20hs

Objetivos:

Existe una gran variedad de problemas de ingeniería, física, economía, logística y matemática cuya solución se obtiene por medio de la minimización de una función sujeta a ciertas restricciones. En particular en el área de las energías renovables estos problemas están permanentemente presentes.

- conocer si el problema que se desea resolver tiene solución,
- discernir acerca del método más conveniente para resolver cada problema,
- implementar los métodos computacionales en un lenguaje de programación e
- interpretar los resultados obtenidos computacionalmente.

Programa analítico:

Unidad I: Minimización sin restricciones.

Condiciones de optimalidad. Métodos tipo gradiente. Métodos tipo Newton y cuasi-Newton. Cuadrados mínimos no lineales. Análisis de convergencia de los métodos.

Unidad II: Minimización sobre conjuntos convexos.

Condiciones de optimalidad. Método de direcciones factibles. Métodos de gradiente proyectado. Programación lineal. Programación cuadrática. Análisis de convergencia de los métodos.

Unidad III: Teoría de multiplicadores de Lagrange.

Condiciones de optimalidad necesarias y suficientes para problemas con restricciones de igualdad no lineales. Condiciones de optimalidad necesarias y suficientes para problemas con restricciones de desigualdad no lineales.

Unidad IV: Métodos con multiplicadores de Lagrange.

Método de barrera. Método de puntos interiores. Método del lagrangiano aumentado. Programación cuadrática secuencial. Análisis de convergencia de los métodos.

Metodología de trabajo:

- Se dictarán clases teórico-prácticas de carácter expositivo siguiendo la literatura referenciada.



- Se destinará una clase por unidad para mostrar la implementación, uso e interpretación de los resultados de los métodos programados en el software Octave.

Metodología de evaluación: Presentación de ejercicios resueltos y Examen final escrito.

Referencias:

1. D.P. Bertsekas. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, Belmont, Massachusetts, 1995.
2. J.F. Bonnans, J.Ch. Gilbert, C. Lemaréchal, and C. Sagastizábal. *Numerical Optimization: Theoretical and Practical Aspects*. Springer-Verlag, Berlin, 2006.
3. J. Nocedal, S.J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, New York, 1999.
4. Springer-Verlag, New York, 1999.
5. A. Izmailov, M. Solodov. *Otimização*. Volume 1: Condições de otimalidade, elementos de análise convexa e de dualidade. IMPA. Rio de Janeiro, Brazil, 2005.
6. A. Izmailov, M. Solodov. *Otimização*. Volume 2: Métodos computacionais. IMPA. Rio de Janeiro, Brazil, 2007.



Métodos Mecanocuánticos basados en la teoría del funcional de la densidad electrónica. Aplicaciones a sistemas nanoestructurados

Carga horaria: 40hs

Objetivos

Este curso está dirigido a estudiantes de doctorado que tienen interés en manejar técnicas de cálculo a partir de primeros principios aplicables a sistemas moleculares y de la materia condensada y aplicables al área de energías renovables. Es deseable que los participantes posean experiencia de programación en el lenguaje FORTRAN y tengan nociones de mecánica cuántica.

Programa analítico:

Unidad I: Introducción.

Series de Fourier y sus extensiones. Desarrollo de Fourier en una dimensión. Integral de Fourier. Generalización de la expansión de Fourier. Redes de Bravais- Redes recíprocas.

Repaso de álgebra lineal: Algebra vectorial en 3 dimensiones, Espacios vectoriales N-dimensionales, Cambio de base.

Funciones de matrices. Funciones ortogonales, autofunciones y operadores. Cálculo variacional. El método variacional en la mecánica cuántica.

Introducción al cálculo de variaciones. Un lema básico.

La ecuación de Euler-Lagrange. Caso de varias variables dependientes. El problema variacional lineal.

Unidad II: Modelo de Thomas Fermi

Modelo de Thomas Fermi. Principio del mínimo de energía y potencial químico. Ecuaciones de Hartree. Ecuaciones de Hartree-Fock. Energía de intercambio y energía de correlación. La aproximación de Born-Oppenheimer.

Unidad III: Teoría del funcional de la densidad electrónica

Teoremas de Hohenberg y Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham

Unidad IV: Energía de correlación e intercambio en DFT



Energía de correlación e intercambio. Definiciones. El hueco de correlación e intercambio. La integral de acoplamiento. Propiedades formales de los funcionales. Funcionales de correlación e intercambio. La aproximación de densidad local (LDA) y la aproximación generalizada de gradientes (GGA). Funcionales híbridos (B3LYP y otros). Problemas: la discontinuidad del potencial químico y otros.

Unidad V: El modelo de Jellium

Unidad VI: Sistemas periódicos.

Teorema de Bloch. Primera prueba del Teorema de Bloch. Condiciones de Born-von Karman. La zona de Brillouin, Sistemas periódicos y ondas planas, sistemas periódicos y bases localizadas, Integración de funciones sobre la primera zona.

Unidad VII: Pseudopotenciales

Aproximación de carozo congelado. Pseudopotenciales que conservan la norma. Construcción de pseudopotenciales, la receta de Troullier y Martins, forma separable de Kleinman y Bylander, estados fantasma, estimación de propiedades de transferibilidad a partir de cálculos atómicos.

Unidad VIII: Programa SIESTA.

Bases localizadas de soporte finito, construcción de las bases, funciones de polarización, radios de corte y energía de confinamiento, Integrales sobre grillas en el espacio real.

Unidad IX: Paquete de programas QUANTUM ESPRESSO

QUANTUM ESPRESSO como una distribución de programas. Programa de cálculo PWSCF: uso de pseudopotenciales y ondas planas para la formulación de las ecuaciones de Kohn-Sham. Integración en el espacio recíproco y técnicas especiales de muestreo. Uso de la técnica de transformadas de Fourier rápidas.

Unidad X: Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo.

Extensión de la DFT al dominio temporal: Teorema de Runge-Gross. Teoría de respuesta lineal (TRL). Cálculo de excitaciones electrónicas en TD-DFT dentro de la TRL. El funcional de correlación e intercambio en TD-DFT. Defectos de los funcionales más usados.

Aplicaciones en el estudio de la reactividad superficial.

Unidad XI: Paquete de programas Gaussian



Introducción al programa Gaussian. Cálculos de energía. Optimización de geometría. Análisis termoquímico y de frecuencia- Cálculo de caminos de reacción.

Unidad XII: Desarrollo reciente de nuevos funcionales de correlación e intercambio: Teoría y aplicaciones

Estado actual y perspectivas futuras acerca del desarrollo de nuevos funcionales de correlación e intercambio semi-locales e híbridos. Formulación teórica, mejoras obtenidas en cuanto a exactitud y eficiencia computacional en aplicaciones de interés actual. Desarrollo de funcionales semilocales y no locales, incluyendo métodos RPA (random phase approximation) y funcionales híbridos basados en RPA. Desarrollo de métodos para la corrección de interacciones de van der Waals de largo alcance. Desarrollo de funcionales para cálculos relativísticos.

Unidad XIII: Aplicaciones a sistemas nanoestructurados

13.1 Aplicaciones en baterías de Litio.

Estudio de materiales carbonosos modificados como ánodos para baterías de ión-litio.

13.2 Aplicaciones a Almacenamiento de Hidrógeno en materiales carbonosos

La problemática del almacenamiento de hidrógeno y el uso de los métodos de cálculo para encontrar una solución. Materiales nanoestructurados y óxidos de grafito.

13.3 Estudios de estabilidad de alambres moleculares. Otras aplicaciones

Se consideran las propiedades de alambres moleculares formados por metales y moléculas intercaladas, de interés en circuitos electrónicos.

13.4 Aplicaciones en el estudio de la reactividad superficial.

Estudio de mecanismos de reacción utilizando el método de la banda elástica, en sistemas simulados aplicando condiciones periódicas de contorno. Estadios iniciales de la adsorción metálica sobre superficies de silicio. Reactividad de superficies de silicio modificadas. Adsorción de tioles sobre superficies metálicas.

13.5. Aplicaciones en Química Orgánica y Biomolecular

Estudios aplicados a compuestos orgánicos y biomoléculas. Relaciones estructura-reactividad, actividad biológica.

13.6 Ajuste de potenciales semiempíricos con cálculos DFT.

Ajuste de potenciales semiempíricos para el estudio de la adsorción de especies moleculares sobre metales con cálculos DFT

CONTENIDOS PRÁCTICOS

Se realizarán clases prácticas en el gabinete de computación aplicando las técnicas de cálculo expuestas.

Handwritten signature



Lista de Prácticos:

CÁLCULO DE PROPIEDADES COHESIVAS Y ELECTRÓNICAS DE SISTEMAS REALES CON PERIODICIDAD EN EL ESPACIO TRIDIMENSIONAL

1- Estudio de una reacción catalizada por una superficie metálica con SIESTA

A. Construcción y prueba de pseudopotenciales utilizando el programa ATOM. Inclusión de "core-corrections" para metales de transición. Tarjeta de entrada para el SIESTA: formato y principales "keywords". Bases atómicas numéricas, construcción automática y optimización variacional empleando el algoritmo simplex.

B. Cálculos de moléculas aisladas. Parámetros de convergencia. Optimización de geometría utilizando gradientes conjugados. Comparación de resultados teóricos con datos experimentales. Cálculos de un metal masivo empleando condiciones periódicas de contorno en tres dimensiones. Determinación de parámetros estructurales. Muestreo del espacio recíproco. Cálculos de una superficie: orbitales difusos, energía superficial.

C. Construcción y optimización de las geometrías de una molécula adsorbida sobre una superficie. Uso mixto de coordenadas cartesianas y coordenadas internas. Determinación de la energía de adsorción. Error por superposición de bases. Análisis del enlace: densidad de estados, densidad electrónica diferencial, cargas de Mulliken.

D. Estudio de una reacción sobre una superficie. Construcción y optimización de geometrías adecuadas para los productos. Búsqueda del camino de reacción utilizando el método de la banda elástica (NEB).

2- Cálculo de propiedades estructurales, tales como parámetro de red, distancia interatómica, bulk modulus, compresibilidad, de un sólido cristalino en función de los diferentes parámetros tales como pseudopotenciales, número de ondas planas y muestreo en el espacio recíproco.

3- Cálculo y comparación de estructuras de bandas y gráficos de densidad de estados total y proyectadas en sistemas metálicos, semiconductores y aislantes. Obtención del valor del band gap. Realización de correcciones en las estructuras de bandas usando el método LDA+U.

Metodología de evaluación

Examen teórico. Desarrollo de un proyecto computacional

Referencias general y específica.

1. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation
2. José M. Soler, Emilio Artacho, Julian D. Gale, Alberto García, Javier Junquera, Pablo Ordejón



- and Daniel Sánchez-Portal. *J. Phys.: Condens. Matter* 14, 2745-2779 (2002) arXiv:cond-mat/0111138, 8 Nov 2001.
3. *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, R.G. Parr y W. Yang, Oxford University Press, New York, 1989.
 4. *Modern Quantum Chemistry*, A. Szabo y N. S. Ostlund, Dover, 1996.
 5. *Theory of the inhomogeneous electron gas*, S. Lundqvist y N. H. March, Plenum, 1983.
 6. R. Parr y W. Yang, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford U. P. 1989.
 7. *Density Functionals: Theory and Applications*, Editado por E. Joubert, Springer 1998, Capítulos 2 y 6.
 8. *Quantum-Mechanical Ab-initio Calculation of the Properties of Crystalline Materials*. Editado por C. Pisani, Springer-Verlag 1996.
 9. *Electronic Structure. Basic theory and practical methods*. Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2004.



Microanálisis por sonda de electrones

Carga Horaria: 40 horas

Objetivos:

Comprender los fundamentos de la técnica. Adquirir los conocimientos y el lenguaje necesarios para interactuar con un operador de microanálisis con sonda de electrones. Conocer las posibles aplicaciones de la técnica; en particular las relacionadas con la caracterización de componentes de dispositivos de almacenamiento y generación de energía.

Programa analítico:

Unidad I: Interacción de electrones con la materia.

Tipos de interacción de los electrones con la materia. Sección eficaz y camino libre medio. Interacciones con núcleos atómicos. Interacciones con electrones atómicos. Simulación de transporte de electrones: método Monte Carlo. Volumen de interacción. Rango de los electrones.

Unidad II: Interacción de fotones con la materia.

Tipos de interacción de fotones con la materia. Sección eficaz y camino libre medio. Efecto Compton. Dispersión Rayleigh. Efecto fotoeléctrico. Procesos de atenuación.

Unidad III: Detectores de fotones.

Espectrómetros dispersivos en energía. Detectores de estado sólido. Cadena electrónica de detección. Tiempo muerto. Picos suma. Picos de escape y de fluorescencia. Asimetría de picos. Eficiencia y resolución. Espectrómetros dispersivos en longitud de onda. Geometrías de Johann y de Johansson. Contador proporcional. Eficiencia y resolución.

Unidad IV: El espectro de rayos x inducido por impacto de electrones.

Líneas de emisión. Líneas de diagrama y líneas satélite . Espectro continuo . Picos espurios. Procesamiento de espectros.

Unidad V: Características del microanálisis con sonda de electrones (EPMA).

Principios el EPMA, Microscopio electrónico de barrido y microsonda de electrones. Resolución espacial. Límite de detección mínima. Análisis cuantitativo . Análisis cuantitativo. Correcciones ZAF. Distribución de ionizaciones con la profundidad.

Unidad VI: Acerca de las muestras.





Condiciones necesarias para las muestras. Distintos recubrimientos conductores. Daños en las muestras. Estudios in situ; ejemplo: estudio de la oxidación de litio en el SEM. Muestras delgadas y muestras "bulk". Microanálisis de partículas. Análisis sin estándares. Nanoanálisis.

Metodología de trabajo: Dictado de clases teóricas. Prácticos con programas procesadores de espectros.

En la medida de la disponibilidad el equipo se hará un práctico en el microscopio electrónico de barrido del LAMARX.

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

1. Scanning electron microscopy and x-ray microanalysis. D. Newbury, D. Joy, P. Echlin, C. Flori, J. Glodstein. 3^o Edición. Springer, 2003.
2. Electron probe microanalysis and scanning electron microscopy in geology. S. Reed. Cambridge University Press, 1996.
3. Principles of Analytical Electron Microscopy. D. C Joy, Jr. A. D. Romig. and J. I. Goldstein, Plenum Press. New York and London. 1989.
4. S. Limandri, M. A. Z. Vasconcellos, R. Hinrichs, J. Trincavelli. Experimental determination of cross sections for K-shell ionization by electron impact for C, O, Al, Si, and Ti, Phys. Rev. A **86** (2012) 042701.
5. C. Visñovezky, S. Limandri, M. E. Canafoglia, R. Bonetto, J. Trincavelli. Asymmetry of characteristic X-ray peaks obtained by a Si(Li) detector, Spectrochim. Acta Part B **62** (2007) 492-498.
6. J. Trincavelli, S. Limandri, A. Carreras, R. Bonetto. Experimental method to determine the absolute efficiency curve of a wavelength dispersive spectrometer, Microsc. Microanal. **14** (2008) 306-314.
7. P. D. Pérez, A. Sepúlveda, G. Castellano J. Trincavelli. Experimental determination of multiple ionization cross sections in Si by electron impact, Phys. Rev. A **92** (2015) 062708.
8. J. Trincavelli, G. Castellano. The prediction of thick target electron bremsstrahlung spectra in the 0.25-50 keV energy range, Spectrochim. Acta Part B **63** (2008) 1-8.
9. J. Trincavelli, G. Castellano. MULTI: an interactive program for quantitation in EPMA, X-Ray Spectrom. **28** (1999) 194-197.
10. S. Segui, J. Trincavelli, G. Castellano, J. Riveros. Simple Model for Surface Ionization in Electron Probe Microanalysis, X-Ray Spectrom. **25** (1996) 110-114.



11. M. Otero, G. Lener, J. Trincavelli, D. Barraco, M. Nazzarro, O. Furlong, E. Leiva. New kinetic insight into the spontaneous oxidation process of lithium in air by EPMA, *Appl. Surf. Science* **383** (2016) 64–70.
12. J. Trincavelli, R. Van Grieken. Peak-to-background method for standardless electron microprobe analysis of particles, *X-Ray Spectrom.* **23** (1994) 254-260.
13. J. Trincavelli, S. Limandri, R. Bonetto. Standardless quantification methods in electron probe microanalysis, *Spectrochim. Acta Part B* **101** (2014) 76–85.



Microscopía electrónica de barrido

Carga Horaria: 40 horas

Objetivos:

Comprender los fundamentos de la técnica. Adquirir los conocimientos y el lenguaje necesarios para interactuar con un operador de microscopía electrónica. Conocer las posibles aplicaciones de la técnica; en particular las relacionadas con la caracterización de componentes de dispositivos de almacenamiento y generación de energía. Estar próximos a la posibilidad de operar un microscopio electrónico de barrido.

Programa analítico:

Unidad I: Interacción de electrones con la materia.

Tipos de interacción de los electrones con la materia. Sección eficaz y camino libre medio. Interacciones con núcleos atómicos. Interacciones con electrones atómicos. Simulación de transporte de electrones: método Monte Carlo. Volumen de interacción. Rango de los electrones.

Unidad II: Microscopía electrónica de barrido

Principios de la microscopía electrónica de barrido. Partes de un microscopio electrónico. Óptica electromagnética. Aberraciones de las lentes. Electrones secundarios. Electrones retrodispersados. Formación de imágenes en el SEM. Detectores de electrones.

Unidad III: Operación y aplicaciones de la microscopía electrónica de barrido.

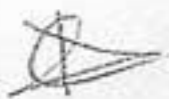
Parámetros controlables: energía del haz de electrones, foco, magnificación, distancia de trabajo, corrección de astigmatismo, tamaño de apertura, "wobble".

Unidad VI: Preparación de muestras.

Muestras en polvo, partículas; ejemplo: carbón mesoporoso. Muestras "bulk". Condiciones necesarias para las muestras. El problema de las muestras aislantes; ejemplo: membranas en celdas de combustible. Distintos recubrimientos conductores. Daños en las muestras. Muestras biológicas: desecación por punto crítico.

Unidad V: Difracción de electrones retrodispersados.

Historia. Sistema de medición. Nociones fundamentales sobre la formación de patrones de Kikuchi. Indexación de patrones. Adquisición de datos. Análisis de datos. Preparación de muestras.





Metodología de trabajo:

Dictado de clases teóricas.

Prácticos con programas simuladores de microscopios electrónicos.

En la medida de la disponibilidad el equipo se hará un práctico en el microscopio electrónico de barrido del Laboratorio de Microscopía Electrónica y Análisis por Rayos X de FaMAF (LAMARX).

Metodología de evaluación: Examen final escrito.

Referencias:

1. Principles of Analytical Electron Microscopy. D. C Joy, Jr. A. D. Romig. and J. I. Goldstein, Plenum Press. New York and London. 1989.
2. Scanning Electron Microscopy – Physics and Image formation and microanalysis, Reimer L. Springer Series in Optical Sciences. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 1985.
3. Electron Microscopy, J. Bazzola, L. Russell, Jones & Bartlett Publishers; 2 Sub edition, 1998.
4. Physical Principles of Electron Microscopy: An Introduction to TEM, SEM, and AEM, R. Egerton, Springer, 2005.
5. Lane, G.S. (1972). Dimensional Measurements. In The use of the Scanning Electron Microscope, Hearle, J.W.S., Sparrow, J.T. & Cross, P.M (Eds.), pp. 219-238. Pergamon Press.
6. M. del Giorgio, J. Trincavelli, J. A. Riveros. Backscattering of 10-35 keV electrons from thick targets at normal incidence, X-Ray Spectrom. **18** (1989) 229-234.
7. M. del Giorgio, J. Trincavelli, J. A. Riveros. Spectral distribution of backscattered electrons: application to electron probe microanalysis, X-Ray Spectrom. **19** (1990) 261-267.
8. Ayaz Hassan, Alejo Carreras, Jorge Trincavelli, Edson Antonio Ticianelli. Effect of heat treatment on the activity and stability of carbon supported PtMo alloy electrocatalysts for hydrogen oxidation in proton exchange membrane fuel cells, Journal of Power Sources **247** (2014) 712-720.



Química Sustentable: Desarrollo de Sistemas Catalíticos y Alternativas para un Desarrollo Sostenible

Carga horaria: 30 hs

Objetivos:

Objetivos: Aprender los principios y fundamentos de la Química Verde o Sustentable.

Conocer los distintos parámetros que permiten cuantificar los procesos utilizados y aquellos que permitan estimar la incidencia de procesos no puestos en marcha aún. Comprender el rol básico de la catálisis dentro de este marco y su importancia en la reducción de residuos y la mejora de la eficiencia de los procesos. Adquirir una visión global de los principales tipos de catalizadores homogéneos y, fundamentalmente, heterogéneos y los distintos tipos de reacciones catalizadas. Conocer los alcances y aportes de los sistemas micelares y de los nuevos materiales como alternativas válidas para alcanzar las metas de sustentabilidad.

Conocer algunos catalizadores y procesos catalíticos actualmente utilizados en la industria petroquímica y en química fina. Conocer los procesos catalíticos actuales y en desarrollo para el aprovechamiento de la biomasa y sus derivados, y su competencia con los procesos instalados en la industria del petróleo. Adquirir criterios de selección, acordes a los principios de una Química Verde y Sostenible, a la hora de analizar, evaluar y/o desarrollar un sistema o proceso catalítico

Programa analítico:

Unidad I: Química Verde y Desarrollo sostenible.

Fundamentos de la química sustentable y de la sostenibilidad. Los principios de la Química Verde. Selección de reactivos, disolventes y oxidantes y/o reductores. El uso de catalizadores. El ahorro de energía y de átomos. La Química Verde en el laboratorio y la industria. Parámetros que indican la sustentabilidad de un proceso. La reducción de efluentes y residuos. El respeto al medio ambiente y el uso de recursos renovables. Procesos industriales convencionales y procesos basados en una química verde. Avances hacia un desarrollo sostenible. Situación actual y perspectivas de futuro.

Unidad II: Catálisis homogénea y Química Verde.

El papel de la catálisis homogénea en la Química Verde. Catalizadores homogéneos de uso generalizado en la industria y el laboratorio, ejemplos. Metales de transición y ligandos:



Propiedades y actividad catalítica. Procesos y reacciones catalíticas homogéneas. Inmovilización de catalizadores homogéneos. Nanocatalizadores.

Unidad III: Catálisis heterogénea y Reactores catalíticos.

El rol de la catálisis heterogénea en la Química Verde. Ventajas de un catalizador heterogéneo y efectos de su aplicación en química. Conceptos básicos: conversión, selectividad, eficiencia catalítica (i.e. TON, TOF). Catalizadores heterogéneos de uso generalizado en la industria y el laboratorio (Ejemplos de aplicación). Los reactores catalíticos (Conceptos básicos y generalidades). Disposición del catalizador. Reactores de flujo continuo (i.e. lecho fijo, lecho fluidizado), semi-continuo y discontinuo (reactores batch). Ejemplos de reactores catalíticos industriales (i.e. alquilación, epoxidación, FCC).

Unidad IV: Diseño de catalizadores heterogéneos.

Síntesis de materiales catalíticos sólidos (Conceptos básicos y generalidades). Materiales sólidos amorfos, laminares y porosos. Óxidos y óxidos mixtos de metales de transición, óxidos laminares dobles (i.e. hidrotalcitas), y otros. Tamices moleculares micro-, meso-, y macroporosos. Zeolitas, zeolitas deslaminadas y zeotipos. Materiales mesoporosos ordenados. La incorporación de sitios activos (Metales nobles y metales de transición) con nuevas propiedades catalíticas. Distintas metodologías síntesis y preparación. Diseño racional de catalizadores heterogéneos. Catalizadores sólidos nano-estructurados y con porosidad controlada. Catalizadores ácido/base y catalizadores redox (Ejemplos). Catalizadores basados en nano-partículas metálicas y óxidos metálicos nano-particulados. Nano-catalizadores. Materiales híbridos orgánico-inorgánicos (i.e. POM's, MOF's). Metales y complejos organometálicos soportados y encapsulados en sólidos amorfos y porosos.

Unidad V: Nuevos materiales. Dendrímeros, multivalencia y catálisis.

Dendrímeros vs polímeros, evolución sintética. Efecto dendrítico y multivalencia. Síntesis, caracterización y aplicaciones de sistemas dendríticos en catálisis homogénea y heterogénea. Polímeros dendronizados. Polímeros naturales y recursos renovables. Dendronización de polímeros naturales. Polímeros hiperramificados como plataformas para catálisis.

Unidad VI: Catálisis micelar. Sistemas microheterogéneos como medios de reacción en Química Sustentable.

Introducción a los sistemas micelares y agregados relacionados. Solubilización de compuestos orgánicos hidrofóbicos en agua. Surfactantes derivados de fuentes renovables. Reacciones en micelas: aplicaciones de la catálisis micelar a la síntesis de compuestos



orgánicos de interés industrial y comercial. Efectos micelares sobre la selectividad de los productos y las velocidades de reacción. Reacciones enantioselectivas. Uso de micelas como moldes (templates) en la síntesis de nuevos materiales. Metalomicelas como catalizadores.

Unidad VII: Diseño de procesos catalíticos heterogéneos.

Aplicación de catalizadores sólidos en procesos de química fina, petroquímica y refino (Ejemplos). Sólidos ácidos (acidez de Brønsted y/o Lewis) como catalizadores en reacciones de: i) alquilación selectiva, ii) MPV-O. Sólidos básicos como catalizadores en reacciones de: i) condensación, ii) transesterificación. Catalizadores heterogéneos redox. Procesos de reducción y de oxidación catalítica selectiva (Ejemplos). Propiedades de adsorción (hidrofobia/hidrofilia), su determinación, control y efectos en la actividad catalítica. Catalizadores bi-funcionales y multi-funcionales (Ejemplos de aplicación). Criterios de selección y ventajas competitivas. Procesos catalíticos multi-etapas en un solo paso ("one-pot") y reacciones catalíticas en cascada (Ejemplos de aplicación).

Unidad VIII: Catalizadores heterogéneos para la transformación de la biomasa.

Los recursos naturales y la biomasa (Conceptos básicos). Tipos de biomasa (Generalidades). La biomasa de tipo ligno-celulósica (Componentes y propiedades). Procesos de transformación directa de la biomasa (fermentación, gasificación, pirólisis, combustión). Obtención de energía, combustibles, y productos químicos a partir de la biomasa. Aplicación de catalizadores heterogéneos en procesos de: a) producción de gas de síntesis ("syn-gas") y procesos posteriores (i.e. Fischer-Trop), b) producción de Hidrógeno, c) producción de bio-líquidos, d) aprovechamiento de los bio-líquidos, e) aprovechamiento de azúcares y derivados, f) obtención de productos de uso en química básica e intermedios ("platform chemicals"), g) aprovechamiento de los "platform chemicals" y otros compuestos derivados de la biomasa (i.e. etanol, glicerol, furfural, ácido succínico, ácido levulínico, etc.). Desarrollo de nuevos procesos catalíticos para la valorización de la biomasa. Situación actual, perspectivas y desafíos. Conclusiones generales.

Modalidad de trabajo: presencial, con dictado de teóricos y seminarios.

Modalidad de evaluación: Examen final escrito

1. P. T. Anastas, J.C. Warner (Eds.), "Green Chemistry: Theory and Practice", Oxford Univ. Press, NY, 1998.
2. R.A. Sheldon, Green Chem. 2007, 9, 1273.



3. P.T. Anastas, I.J. Levy, K.E. Parent (Eds.), "Green Chemistry Education, Changing the Course of Chemistry" ACS SYMPOSIUM SERIES 1011. 2009.
4. C.O. Kinen, L.I. Rossi, R. Hoyos de Rossi, Green Chem. 2009, 11(2), 223.
5. M. Rueping, B.J. Nachtsheim, Beilstein J. Org. Chem. 2010, 6(6), 1.
6. M.I. Velasco, C.O. Kinen, R. H. de Rossi, L.I. Rossi. Dyes Pigm. 2011, 90, 259.
7. L.I. Rossi, M.I. Velasco. P. Appl. Chem. 2012, 84(3), 819.
8. R.C. Cioc, E. Ruijter, R.V.A. Orru. Green Chem. 2014,16, 2958.
9. Y.Ni, D. Holtmann, F. Hollmann. ChemCatChem 2014, 6, 930.
10. P. Pollet, E.A. Davey, E.E. Ureña-Benavides, C.A. Eckert, C.L. Liotta. Green Chem. 2014, 16, 1034.
11. A.P. Dicks, A. Hent. "Green Chemistry Metrics. A Guide to Determining and Evaluating Process Greenness", Springer, 2015. Ed. S.K. Sharma.
12. P. W.N.M. van Leeuwen, Homogeneous Catalysis, Understanding the Art. 2004.
13. R.A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld (Eds.), "Green Chemistry and Catalysis", Wiley-VCH, Weinheim, 2007.
14. P. Tundo, A. Perosa, F. Zecchini, (Eds.), "Methods and Reagents for Green Chemistry". Wiley 2007.
15. S. T. Oyama (Ed), "Mechanisms in Homogeneous and Heterogeneous Epoxidation Catalysis". 2008.
16. N. Yan, C. Xiao, Y. Kou. Coord. Chem. Rev. 2010, 254, 1179.
17. R.A. Michelin, P. Sgarbossa, A. Scarso, G. Strukul, Coord. Chem. Rev. 2010, 254, 646.
18. R. Narayanan Green Chem. Lett. Rev. 2012, 5(4), 707.
19. P. Gupta, S. Paul. Catal. Today 2014, 236, 153.
20. P.T. Anastas, M.M. Kirchhoff, T.C. Williamson, Appl. Catal. A: Gral. 2001, 221, 3.
21. J. Hagens (Ed.), "Industrial Catalysis", Wiley-VCH, Weinheim, 2006.
22. F. Bartholomeu, P. Farrauto (Eds.), "Fundamentals of Industrial Catalytic Processes", AICHE, Wiley-Interscience, Weinheim, 2006.
23. A. Corma, J. Catal. 2003, 216(1-2), 298.
24. A. Corma, U. Diaz, M.E. Domine, V. Fornes, Angew. Chem. Int. Ed. 2000, 39(8), 1499.
25. A. Corma, M.T. Navarro, Stud. Surf. Sci. Catal. 2002, 142A, 487.
26. A. Corma, M.E. Domine, L.T. Nemeth, S. Valencia, J. Am. Chem. Soc. 2002,124(13), 3194.
27. A. Corma, M.E. Domine, Chem. Commun. 2005, 4042.
28. M.E. Domine, M.C. Hernández-Soto, Y. Pérez, Catal. Today. 2011, 159, 2.
29. A. Corma, H García, F.X. Llabrés i Xamena, Chem. Rev. 2010, 110 (8), 4606.
30. U. Ravon, M.E. Domine, C. Gaudillere, A. Desmartin-Chomel, D. Farruseng, New J. chem. 2008, 32(6), 937.



31. U. Ravon, M. Savonnet, S. Aguado, M.E. Domine, E. Janneau, D. Farrusseng, *Microp. Mesop. Mater.* 2010, 129, 319.
32. M.J. Sabater, M.E. Domine, A. Corma, *J. Catal.* 2002, 210(1), 192.
33. D. Atruc, A. Berger, B.D. Chandler, M.C. Daniel, L.H Gade, J.D. Gilbertson, R. Haag, C., Hajji, J.K. Kassube, R.J.M. Klein Gebbink, G. van Koten, P.W.N.M. van Leeuwen, J.N.H. Reedk, F. Ribaudó, J. Ruiz, "Dendrimer Catalysis", Vol 20, Springer, 2006.
34. F. Vögtle, G. Richardt, N. Werner, "Dendrimer Chemistry Concepts, Synthesis, Properties, Applications". Wiley-VCH, 2009.
35. J.M.J. Freèchet, D.A. Tomalia, "Dendrimer and other Dendritic Polymers", John Wiley & Sons Ltd., 2001.
36. P.A. Chase, G. van Koten, "Dendrimers incorporation metallopincer functionalities: synthesis and applications", cap. 18, Elsevier, 2007.
37. M.A. Dubé, S. Salehpour. *Macromol. React. Enginneeer.* 2014, 8, 7.
38. A.M. Caminade, R. Laurent, A. Ouali, J.P. Majoral, *Inorg. Chim. Acta.* 2014, 409, 68.
39. R.S. Bagul, N. Jayaraman. *Inorg. Chim. Acta* 2014, 409, 34.
40. M. N. Khan, "Micellar Catalysis", Surfactant Science Series, Vol. 133, CRC Press, Boca Raton, 2007.
41. T. Dwars, E. Paetzold, G. Oehme, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005, 44, 7174.
42. G. Cao, D. Liu. *Adv. Coll. Inter. Sci.* 2008, 136, 45.
43. L. Pérez, A. Pinazo, R. Pons, M. R. Infante, *Adv. Coll. Interface Sci.* 2014, 205, 134.
44. J. Zhang, X-G Meng, X-Ch Zeng, X-Q Yu, *Coord. Chem. Rev.* 2009, 253, 2166.
45. N. Nuraje, H. Bai, K. Su, *Progress in Polym. Sci.* 2013, 38, 302.
46. T. Deligeorgiev, N. Gadjev, A. Vasilev, S. Kaloyanova, J. J. Vaquero, J. Álvarez- Builla, *Mini Rev. Org. Chem.* 2010, 7, 44.
47. G. La Sorella, G. Strukul, A. Scarso, *Green Chemistry*, 2015, 17, 644.
48. B. H. Lipshutz, B. R. Taft, A. R. Abela, S. Ghorai, A. Krasovskiy, C. Duplais, *Platinum Met. Rev.* 2012, 56, 62.
49. A. Corma, H García, *Chem. Rev.* 2003, 103(11), 4307.
50. A. Corma, M.E. Domine, S. Valencia, *J. Catal.* 2003, 215(2), 294.
51. M.J. Climent, A. Corma, P. De Frutos, S. Iborra, M. Noy, A. Velly, P. Concepción, *J. Catal.*, 2010, 269, 140.
52. A. Chica, A. Corma, M.E. Domine, *J. Catal.* 2006, 242(2), 299.
53. A. Corma, M. Renz, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 298.
54. C. Aprile, A. Corma, M.E. Domine, H García, C. Mitchell, *J. Catal.* 2009, 264, 44.
55. M.E. Domine, M.C. Hernández-Soto, M.T. Navarro, Y. Pérez, *Catal. Today*, 2011, 172, 13.
56. M.J. Climent, A. Corma, S. Iborra, *Green Chem.* 2014, 16(2), 516.



57. G.W. Huber, S. Iborra, A. Corma, *Chem. Rev.* 2006, 106, 4044.
58. G.W. Huber, A. Corma, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 7184.
59. J.N. Chheda, G.W. Huber, J.A. Dumesic, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 7164.
60. A. Corma, S. Iborra, A. Velty, *Chem. Rev.* 2007, 107, 2411.
61. M.E. Domine, E.E. Iojoiu, T. Davidian, N. Guilhaume, C. Mirodatos, *Catal. Today* 2008, 133-135, 565.
62. M.E. Domine, A.C. van Veen, Y. Schuurman, C. Mirodatos, *ChemSusChem* 2008, 1(3), 179.
63. K.S. Arias, S.I. Al-Resayes, M.J. Climent, A. Corma, S. Iborra, *ChemSusChem* 2013, 6, 123.
64. K.S. Arias, M.J. Climent, A. Corma, S. Iborra, *ChemSusChem* 2014, 7(1), 210.
65. A. Corma, B. Oliver-Tomas, M. Renz, I. L. Simakova, *J. Mol. Catal. A: Chem.* 2014, 388-389, 116.
66. J.M. Pinazo, M.E. Domine, V. Parvulescu, F. Petru, *Catal. Today*, 2015, 239, 17.

A



Termodinámica, transferencias de masa y energía

Carga horaria: 40 hs

Objetivos: desarrollar en el alumno la capacidad para entender los procesos físicos de un fluido en movimiento. El modelado del fluido se hace bajo la suposición de equilibrio termodinámico y por ello se estudia primeramente las leyes que gobiernan dicho equilibrio.

UNIDAD I: Termodinámica

- 1) Principios básicos de la Termodinámica, Condiciones de equilibrio
- 2) Procesos reversibles y el principio de máximo trabajo.
- 3) Transformadas de Legendre, Principio extremal en las representaciones transformadas de Legendre,
- 4) Relaciones de Maxwell, Aplicaciones de los potenciales termodinámicos,
- 5) Estabilidad de los sistemas termodinámicos, Transiciones de fase de primer orden,
- 6) Transiciones de fase en sistemas multicomponentes.

UNIDAD II: Conducción, convección y radiación térmica en sólidos y fluidos

- 1) Ecuación general de la transferencia de calor
- 2) Conducción térmica en sólidos
- 3) Conducción térmica en fluidos incompresibles
- 4) Conducción térmica en fluidos compresibles
- 5) Conducción térmica en medios finitos e infinitos
- 6) Ley de similaridad para transferencia de calor
- 7) Transferencia de calor en capa límite
- 8) Convección
- 9) Radiación

UNIDAD III: Difusión

- 1) Ecuación dinámica para una mezcla de fluidos
- 2) Coeficientes de transferencia de masa y difusión térmica
- 3) Difusión de partículas suspendidas en un fluido
- 4) Difusión en medios porosos.



Metodología de trabajo: 4 horas de contacto semanales para la teoría y asignación de problemas al final de cada tema.

Metodología de evaluación:

La evaluación consta de la aprobación de todas las guías de problemas y de un examen final escrito, en el cual se evaluará la comprensión global del curso.

Cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas - prácticas.

Referencias:

1. Callen, Herbert B. "Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics." (1998): 164-167.
2. White, Frank M., and Isla Corfield. *Viscous fluid flow*. Vol. 3. Boston: McGraw-Hill Higher Education, 2011.
3. Bergman, Theodore L., and Frank P. Incropera. *Fundamentals of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons, 2011.
4. Hahn, David W., and M. Necati Öz
5. ışık. *Heat conduction*. John Wiley & Sons, 2012.



Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados. Aplicaciones en electrocatálisis

Carga horaria: 40 h

Objetivos:

El objetivo del curso es mostrar un marco conceptual unificado e interdisciplinario general en el estudio y desarrollo de electrocatalizadores para celdas de combustibles. Este contribuirá a fundamentar las bases experimentales para diseñar nuevas fuentes de energía eficientes y de bajo impacto ambiental, incentivando el estudio de las propiedades catalíticas de micro y nanoagregados de metales de transición y compuestos orgánicos. Dentro de los mismos se tratará de generar un conocimiento más profundo sobre los componentes activos de modo tal de que los mismos puedan ser usados para lograr una mayor eficiencia de estos dispositivos. Asimismo a través de este curso de posgrado se desarrollarán los fundamentos de Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) y los diferentes modos de funcionamiento para lograr materiales nanoestructurados con una funcionalidad bien definida, y así poder controlar las etapas de preparación de la superficie.

Programa analítico:

Unidad I: Revisión de contenidos básicos en Electroquímica

Propiedades de equilibrio de electrolitos- Interfaz electrodo/solución

Modelo (simplificado) de Debye-Hückel.- Introducción Interfaz electrodo/solución

Modelos de la doble capa electroquímica: a) Modelo de la doble capa compacta de Helmholtz. b)

Modelo de la carga difusa de Gouy-Chapman. c) Modelo de Stern. d) Modelo de la triple capa de

Grahame. *Cinética electroquímica* Ecuación de Butler-Volmer. Ecuación de Tafel. Influencia del transporte de masa sobre la cinética del electrodo

Derivación cinética de la ecuación de Cottrell. Control mixto (difusional y carga)

Unidad II: Modelos de Nucleación y Crecimiento

Formación y crecimiento de un cristal. Ecuación de Gibbs-Thompson

Mecanismos de nucleación 2D ó 3D, de carácter instantáneo o progresivo.

Crecimiento de núcleos independientes o interactuantes.

Formación de monocapas y multicapas, (2D).

Estructuras atómicas de superficie -Adsorción localizada (2D). Deposición sub-potencial (UPD).

Nucleación- coalescencia, (3D).

Modelos teóricos adimensionales 2D y 3D en substratos planos. Ajuste de curvas





Experimentales a modelos teóricos de nucleación y crecimiento.

Correlaciones fundamentales entre la estructura superficial, composición química y actividad catalítica del material de electrodo. Optimización de los procesos de transferencia de carga y de transferencia de materia.

Unidad III: Deposición de metales

Aspectos atomísticos de la electrodeposición de metales

Mecanismo de transferencia del ion al borde del escalón y mecanismo en la terraza. Densidad de corriente local, parcial y global. Movilidad del perfil de superficie. Difusión en superficie y desplazamiento de ad-átomos- Deposición electroless. Mecanismos generales- deposición de desplazamiento- deposición autocatalítica.

Unidad IV: Electrodo Modificados para celdas de combustibles

Modificación superficial de electrodos con compuestos inorgánicos.

Modificación superficial de electrodos con monocapas de compuestos orgánicos

Diferentes soportes utilizados para la formación de electrocatalizadores para diferentes celdas de combustibles, celdas solares, etc

Electrocatalizadores dispersados para celdas de combustibles. Influencia de la morfología superficial del electrodo sobre la cinética de reacciones electrocatalíticas

Unidad V: Caracterización de superficies

Caracterización de Superficies por microscopía de Fuerza Atómica (AFM).

Introducción. Principios básicos. Microscopía de Fuerza Atómica (AFM).

Modos de operación en AFM. Técnicas de preparación de muestra para AFM.

Ventajas y limitaciones en AFM. Aplicaciones. Aplicaciones de AFM en la caracterización de procesos en superficies de electrodos para celdas de combustible, celdas solares, etc

Metodología de trabajo:

Desarrollo de clases teóricas y trabajos prácticos de laboratorio

Prácticos de Laboratorio: Métodos químicos y electroquímicos de preparación superficial con estructuras bien definidas (metales, semiconductores y compuestos orgánicos) para utilizarlos como sustratos para luego obtener diferentes electrodos para celdas de combustibles, celdas solares, etc. Caracterización de electrodos obtenidos en el laboratorio por técnicas electroquímicas convencionales. aplicaciones de Voltametría Cíclica (CV), Pulsos de Potencial (PP) y Espectroscopia de Impedancia Electroquímica.





Caracterización de superficies de electrodos nanoestructurados por AFM en aire y en ambiente controlado de los electrodos.

Caracterización de interfaces por EC-AFM in-situ. Obtención de imágenes en diferentes regiones de la VC.

Metodología de evaluación: Examen final escrito

Referencias:

1. *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*. Allen J. Bard. L.R. Faulkner. John Wiley & Sons, INC. New York.. second edition, 2001.
2. a) *Interfacial Electrochemistry*. Elisabeth Santos and Wolfgang Schmickler. Second edition. Oxford University Press. 2010. b) *Interfacial Electrochemistry*. Wolfgang Schmickler. First edition. Oxford University Press, 1996.
3. *The electrode potential*. S. Trasatti. In: *Comprehensive Treatise of Electrochemistry*. Vol 1. Ed. J.O'M. Bockris, B.E. Conway, E. Yeager. Plenum Press. 1980.
4. Fuentes S., A valle L., Quaino P, Santos E. Decoración de Au y Pt sobre los borde de escalón de grafito pirolítico altamente orientado. Aportes Científicos en PHYMATH. San Fernando del Valle de Catamarca: Oficina de Publicaciones Cesar Barros. 2013 vol.3 n°. p91 - 102. issn 2313-9455.
5. *Electrochemistry for Materials Science*. W Plieth. Ed. Elsevier. First edition 2008.
5. Maria F. Juarez, Silvina Fuentes, Germán J. Soldano, Lucia A valle and Elisabeth Santos . Spontaneous formation of metallic nanostructures on Highly Oriented Pyrolytic Graphite (HOPG): an ab-initio and experimental study. FARADAY DISCUSSIONS. Cambridge: ROYAL SOC CHEMISTRY. 2014 vol. n°172. p1 - 21. issn 1364-5498.
6. F.A. Filippin, O.E. Linarez Pérez, M. López Teijelo, R.D. Bonetto, J. Trincavelli, I.B. A valle, Thickness determination of electrochemical titanium oxide (Ti/TiO₂) formed in HClO₄ solutions *electrochimica acta*; lugar: amsterdam; año: 2014 vol. 129 p. 266 - 275.
7. Ana.S. Fuentes, A.F. Filippin, M. del C. Aguirre., Pd Nucleation and Growth Mechanism Deposited on Different Substrates. *Procedia Materials Science* 8 (2015) 541 – 550.
9. M.del C. Aguirre, A.S.Fuentes, A.F. Filippin, Pd/Ti electrocatalyst in technological significance reactions, *Procedia Materials Science* 9 (2015) 3 – 12.



Tecnologías del hidrógeno y pilas de combustible

Carga Horaria: 40 horas

Objetivos:

La energía es un recurso estratégico para el desarrollo socio-productivo de un país y Argentina cuenta con grandes ventajas en la materia debido a su amplia matriz de fuentes renovables y no renovables, además de los avances tecnológicos que permiten un consumo cada vez más eficiente. La progresiva disminución de las reservas de combustibles fósiles y los problemas medioambientales asociados a su combustión obligan a la búsqueda de nuevas alternativas energéticas. En este contexto, el hidrógeno surge como un nuevo "vector energético", además, con importantes ventajas. El hidrógeno se presenta así como uno de los mejores candidatos para ser "el combustible del futuro".

El Curso de tecnologías de hidrógeno y pilas de combustible engloba toda la cadena del hidrógeno, comenzando por la producción y finalizando con su utilización, pasando por todos los procesos intermedios. Además se desarrollará todas las aplicaciones que tiene el hidrógeno como combustible y las que tiene las pilas de combustible en sistemas estacionarios y móviles.

Objetivos específicos:

Se pretende que el asistente al curso adquiera habilidades para:

- Relacionar las propiedades fisicoquímicas del hidrógeno con su potencialidad como vector energético.
- Manejar los principios fundamentales sobre formas de producción, almacenamiento y transporte de hidrógeno.
- Comprender las diferentes tecnologías asociadas a la generación de energía eléctrica mediante pilas a combustible.
- Analizar, comparar y evaluar la potencialidad de una economía energética basada en el hidrógeno frente a las alternativas convencionales y otros no convencionales.

Programa analítico:

Unidad I: Propiedades del hidrógeno

Propiedades físico-química del hidrógeno. Características del hidrógeno como vector energético

Unidad II: Producción de hidrógeno



El hidrógeno como almacenador y transportador de energía. Producción convencional de hidrógeno. Hidrógeno y formas renovables de energía: energía solar y energía eólica. Hidrógeno a partir de alcoholes e hidrocarburos. Producción de hidrógeno por electrólisis de agua: tecnologías disponibles. Obtención mediante ciclos térmicos. Purificación del hidrógeno.

Unidad III: Almacenamiento de hidrógeno

Compresión y licuefacción del hidrógeno: tecnologías disponibles y aplicaciones; ventajas y desventajas. Almacenamiento químico de hidrógeno: hidruros iónicos e hidruros complejos; aplicaciones. Almacenamiento físico-químico: hidruros intersticiales con aleaciones metálicas. Almacenamiento electroquímico. Almacenamiento de hidrógeno y nanotecnología.

Unidad IV: Transporte de hidrógeno y seguridad

Formas de transportar hidrógeno. La experiencia internacional. Normas vigentes. Hoja de seguridad. Explosividad del hidrógeno. El hidrógeno frente a otros combustibles gaseosos.

Unidad V: Pilas a combustible (I): Energía a partir de hidrógeno

Principios y fundamentos. Termodinámica y cinética electroquímicas de las pilas a combustible. Clasificación de las pilas a combustible: tipos de electrolitos; temperaturas de trabajo; catalizadores. Modelo electroquímico de PEMFC y SOFC. Modelo termodinámico de la pila y sistemas auxiliares.

Unidad VI: Pilas a combustible (II): aplicaciones

Pilas a combustible para usos estacionarios, móviles y portátiles. Diseño y Dimensionamiento de sistemas. Ventajas y desventajas de cada tecnología.

Unidad VII: Otras aplicaciones del hidrógeno:

El hidrógeno como combustible en motores de combustión interna. El uso de cortes de combustible con hidrógeno.

Unidad VIII: Economía del hidrógeno

Hacia una economía del hidrógeno. Generación distribuida. Hidrógeno y desarrollo estratégico. Geopolítica energética. Promoción de hidrógeno en el mundo y en la Argentina. Legislaciones. Estado de desarrollo.

Metodología de trabajo:

Se desarrollarán mediante un método expositivo-participativo, según se detalla:



- Exposición por parte de los docentes
- Exposición de las ideas previas que poseen los estudiantes respecto de un tema.
- Asignación de tareas de investigación sobre contenidos del programa y extensiones del mismo.
- Exposición de los estudiantes sobre alguno de los temas elegidos

Metodología de evaluación: Examen final escrito

Referencias:

1. Srinivasan, Supramaniam. Fuel Cells: from fundamentals to applications; editorial Springer: Nueva York: 2006.
2. Busby, Rebecca. Hydrogen and Fuel Cells: a comprehensive guide; editorial Penn Well Corporation, Tulsa (Oklahoma): 2005.
3. Mench, Matheu. Fuel Cell Engines; editorial John Wiley & sons, Nueva jersey: 2008.
4. Rodríguez Varela, F.J.; Solorza Feria, O.; Hernández Pacheco, E. (editores); Celdas de Combustible Ecológicas; editorial Y1d Books; Montreal: 2010.
5. Dubois, René; Perazzo, Robert; Triaca, Walter editores); Hidrógeno y la energía del futuro; Serie de Publicaciones Científicas N° 1, Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales y Academia Nacional de Ingeniería; Buenos Aires: 2004.
6. EGG & Technical Services; Fuel Cell Handbook(7ª edición); US Department of Energy, Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory; Morgantown, West Virginia: 2004.
7. O'Hayre, Ryan; Cha, Suk-Won; Colella, Whitney; Fuel Cell: Fundamentals, editorial John Wiley & Sons, Nueva jersey: 2009.
8. Rifkin, Jeremy; "La economía del hidrógeno"; editorial Paidós, Barcelona: 2002.
9. Colleen Spiegel, "PEM Fuel Cell Modeling and Simulation Using MATLAB". Editorial ELSEVIER, San Diego, California, 2008.
10. Frano Barbir, Angelo Basile and T. Nejat Veziroglu, "Compendium of Hydrogen Energy." publicado por Elsevier Ltd, Cambridge, ,2016.
11. J. Franco, H. Fasoli, A. Saguinetti, MJ, Lavorante, World Congress & Exhibition ENGINEERING 2010 -ARGENTINA, Buenos Aires, AR
12. G. Correa, F. Borello, M. Santarelli, Sensitivity analysis of stack power uncertainty in a PEMFC-based powertrain for aircraft application, Int. J. Hydrogen Energy. 40 (2015) 10354–10365. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.05.133.



13. G. Correa, M. Santarelli, F. Borello, E. Cestino, G. Romeo, Flight test validation of the dynamic model of a fuel cell system for ultra-light aircraft, Proc. Inst. Mech. Eng. Part G J. Aerosp. Eng. 229 (2015) 917-932. doi:10.1177/0954410014541081.
14. G. Correa Perrlmutter, D. Fernandez, M. Gaudiano, L. Mathe, E. Moschen, P. Munoz, Sizing and optimal energy management in an electric vehicle with fuel cell using dynamic vehicle models, in: 2014 IEEE Bienn. Congr. Argentina, ARGENCON 2014, 2014. doi:10.1109/ARGENCON.2014.6868590.
15. G. Correa Perelmutter, L. Mathé, E. Moschen, P. Muñoz, Dimensionamiento y Modelado de un Vehículo Eléctrico Propulsado por Pilas de Combustible. Análisis Económico y de Factibilidad, Rev. Fac. Ciencias Exactas, Físicas Y Nat. 1 (2014) 59-66. <http://revistas.unc.edu.ar/index.php/FCEFYN/article/view/6865>.
16. G. Romeo, F. Borello, E. Cestino, Design of inter-city transport aircraft powered by fuel cell & flight test of zero emission 2-seater aircraft powered by fuel cells, Electr. Syst. Aircraft, Railw. Sh. Propulsion, ESARS. 8 (2012) 0-10. doi:10.1109/ESARS.2012.6387492.



Tecnología Dish Stirling

Carga horaria: 40 hs.

Objetivos: Impartir al alumno conocimientos que le permitan entender la dinámica de los motores Stirling y su aplicación como generador eléctrico termo solar

Programa analítico:

Unidad I: Los principios básicos del motor Stirling

- El ciclo de Stirling
- Variables de referencia.
- El ciclo "estático",
- El ciclo de Carnot.
- El método de Schmidt

Unidad II: Condiciones de equivalencia para variaciones de volumen

- Configuration cinemática
- Espacio muerto adicional
- Volumen total barrido

Unidad III: Optimización.

- Tasa de compresión
- Análisis de Schmidt
- Implicaciones en el diseño general.

Unidad IV: Correlaciones de transferencia de calor

- Turbulencia
- Tiempo de dispersión,
- Contribución de modelado inverso
- Contribución de escaleamiento

Unidad V: Adiabaticidad

- El test de Archibald
- Espacio volumen variable
- Difusión térmica vs convección
- Espacio muerto
- Simulación de performance

Handwritten signature



Unidad VI: Similitud dinámica e intrínseca.

- Similitud dinámica.
- Ejemplo numérico
- Respuesta transiente del regenerador
- Escaleamiento y similitud
- Variables dependientes e independientes

Unidad VII: Flexi scale

- Dimensión del camino de flujo
- Condiciones operativas
- La matriz del regenerador

Unidad VIII: Correlaciones de transferencia de calor.

- Aplicaciones a distintos diseños
- Corroboración de análisis dimensional
- Profundidad de penetración termal
- Más similitud intrínseca

Unidad IX: Formulación Lagrangeana

- Contexto y tipo de muestreo
- Estrategia de cálculo computacional
- Mecánica de colisiones
- Condiciones iniciales y de contorno.

Metodología de trabajo:

- Cuatro horas de contacto semanales para las clases teóricas y asignación de problemas al final de cada tema.
- Clases prácticas de diseño y toma de datos en los laboratorios del IUA
-

Metodología de evaluación:

La evaluación consta de la aprobación de todas las guías de problemas y de un examen final escrito, en el cual se evaluará la comprensión global del curso.

Referencias:



1. Allan J Organ, STIRLING CYCLE ENGINES: Inner workings and design, John Wiley & Sons, Ltd, United Kingdom, 2014.
2. Nicolae Badea, Design for Micro-Combined Cooling, Heating and Power Systems: Stirling Engines and Renewable Power Systems (Green Energy and Technology). John Wiley and Sons, New York, NY. 2015.
3. Finkelstein T and Organ A J 2001 Air Engines Originally published by Professional Engineering Publishing, London and Bury St. Edmunds. (2005 onwards: John Wiley and Sons, Chichester).
4. Organ A J 1992 Thermodynamics and Gas Dynamics of the Stirling cycle machine. Cambridge University Press, Cambridge.
5. Organ A J, 1997, The Regenerator and the Stirling Engine John Wiley & Sons, Ltd, United Kingdom.
6. Stirling engine design parameters using neural networks, Renewable Energy, Volume 74, 2015, Pages 855-866
7. Organ A J, 1997, The Regenerator and the Stirling Engine John Wiley & Sons, Ltd, United Kingdom.
8. Varun Punnathanam, Prakash Kotecha, Effective multi-objective optimization of Stirling engine systems, Applied Thermal Engineering, Volume 108, 2016, Pages 261-276, ISSN 1359-4311
9. Jiří Podešva, Zdeněk Poruba, The Stirling engine mechanism optimization, Perspectives in Science, Volume 7, 2016, Pages 341-346, ISSN 2213-0209



Tópicos especiales sobre control de convertidores electrónicos de potencia

Carga horaria: 40hs

Objetivos y Justificación:

- a) Introducir conceptos fundamentales, a modo de repaso, de sistemas continuos, discretos y muestreados y las ventajas del uso del control digital respecto al control analógico.
- b) Analizar las principales formas de aproximar controladores clásicos diseñados en el tiempo continuo para su implementación en microprocesadores. Introducir los controladores modelados directamente en el tiempo discreto.
- c) Introducir el concepto de atraso de la implementación digital y su efecto en la estabilidad del sistema digital. Modelación en el espacio de estado discreto.
- d) Presentar el diseño de controladores en el espacio de estado para el control de inversores.
- e) Presentar el diseño de controladores digitales utilizando el principio del modelo interno. Enfoques por función de transferencia y por espacio de estado. Aplicación al control de inversores monofásicos y trifásicos alimentados en tensión.

Al finalizar el curso el estudiante tendrá capacidad para diferenciar entre los sistemas continuos y discretos y las ventajas de la implementación digital de controladores así como su aplicación al control de convertidores electrónicos de potencia. Adquirirá los conocimientos necesarios para modelar y diseñar controladores digitales directamente obtenidos en el dominio discreto, tales como los de tiempo mínimo y predictivos. Será capaz de modelar sistemas dinámicos en el espacio de estado contemplando los tiempos de atraso de una implementación digital real y adquirirá el conocimiento de algunas técnicas de diseño utilizando la realimentación de los estados de tales sistemas dinámicos. Todos los conocimientos adquiridos, serán ejemplificados y validados utilizando estructuras de conversión con electrónica de potencia.

Programa analítico:

Unidad I: INTRODUCCIÓN. CONCEPTOS FUNDAMENTALES.

Sistemas continuos, discretos y muestreados. Ventajas del uso del control digital respecto al control analógico. Señales en sistemas muestreados. Ventajas y desventajas del uso de la transformada Z.



Unidad II: ANÁLISIS DE SEÑALES Y SISTEMAS MUESTREADOS.

Muestreo y reconstrucción de señales. Muestreador ideal. Mantenedor de orden cero (ZOH), mantenedor de primer orden (FOH). Frecuencia de solapamiento, aliasing, oscilaciones ocultas. Función de transferencia pulso de lazo abierto y de lazo cerrado.

Unidad III: ANÁLISIS DE SISTEMAS DISCRETOS.

Respuesta en el tiempo de sistemas discretos. Efecto de los polos de lazo cerrado sobre la respuesta transitoria del sistema, en el plano z . Mapeo conforme entre los planos complejos s y z . Errores en estado estacionario para entradas en escalón, rampa e hipérbola de sistemas de tipo 0, 1 y 2.

Unidad IV: REDISEÑO DIGITAL.

Aspectos sobre la selección de la frecuencia de muestreo. Técnicas de aproximación de controladores modelados en tiempo continuo. Diseño clásico de controladores discretos utilizando el lugar de las raíces en el plano z : Controladores P, PD, PI, PID, de adelanto y de atraso de fase.

Unidad V: CONTROLADORES CONCEBIDOS EN EL DOMINIO DEL TIEMPO DISCRETO.

Controlador deadbeat o de tiempo mínimo. Controlador predictivo OSAP (One-Sampling-Ahead Preview) y OSAP modificado. Controladores PI, PD y PID predictivos.

Unidad VI: PRINCIPIO DEL MODELO INTERNO PARA SISTEMAS DISCRETOS.

Principio del modelo interno para sistemas discretos LIT de una entrada una salida (SISO): Controladores repetitivos. Controladores resonantes. Aplicación a inversores monofásicos y trifásicos de potencia.

Unidad VII: MODELACIÓN DE SISTEMAS DISCRETOS EN EL ESPACIO DE ESTADO.

Modelo de espacio de estado en tiempo discreto con atraso de la implementación digital. Controlabilidad y observabilidad de sistemas discretos. Realizabilidad.

Unidad VIII: PROYECTO DE CONTROLADORES EN EL ESPACIO DE ESTADO. APLICACIÓN A CONVERTIDORES ELECTRÓNICOS DE POTENCIA

Técnica de ubicación de polos por realimentación de estados. Proyecto de sistemas seguidores o rastreadores para plantas de tipo 0 (sistema servo). Limitación de la sobrecarga de integradores. Servo controlador aplicado al control de tensión de inversores monofásicos y trifásicos. Lazos anidados de corriente y tensión.



Unidad IX: PROYECTO DE CONTROLADORES CON ENFOQUE ENTRADA-SALIDA. APLICACIÓN A CONVERTIDORES ELECTRÓNICOS DE POTENCIA.

Aplicación del Principio del Modelo Interno con enfoque entrada-salida a convertidores electrónicos de potencia. Inversores monofásicos y trifásicos de tensión. Controladores repetitivos y resonantes.

Unidad X: PROYECTO DE CONTROLADORES CON ENFOQUE ENTRADA-SALIDA Y ESPACIO DE ESTADOS. APLICACIÓN A CONVERTIDORES ELECTRÓNICOS DE POTENCIA.

Aplicación del Principio del Modelo Interno con enfoque entrada-salida más realimentación de estados a convertidores electrónicos de potencia. Inversores monofásicos y trifásicos de tensión.

Metodología de dictado:

Se dictarán clases teóricas empleando diferentes herramientas didácticas. Se incluirán guías para la resolución de problemas y simulaciones en computadoras digitales con programas dedicados al control digital y la electrónica de potencia.

Metodología de evaluación:

La asistencia deberá ser como mínimo del 80% a las clases teóricas y prácticas.

Los alumnos deberán realizar la totalidad de los trabajos prácticos que incluyen la resolución de guías de ejercicios y la implementación de simulaciones en computadoras digitales.

La evaluación final consistirá en la realización de un trabajo integrador individual por parte del alumno, sobre un tema a designar, que incluirá revisión de bibliografía especializada, modelización, etapa de diseño y de simulación para validar el análisis realizado. Dicho trabajo será evaluado con una nota entre 0 (cero) y 10 (diez).

Referencias:

1. Ogata, Katsuhiko; "Sistemas de Control de Tiempo Discreto"; Prentice Hall; Segunda Edición.
2. Kuo, Benjamín C.; "Sistemas de Control Digital"; Compañía Editorial Continental, Segunda Edición en Inglés (Primera Edición en Español).
3. Phillips, Charles L.; Tagle, Troy H.; "Digital Control System Analysis and Design"; Prentice Hall, Third Edition.
4. Aström, Karl J.; Wittenmark, Björn; "Computer-Controlled Systems, Theory and Design"; Prentice Hall, Third Edition.



5. Hemerly, E.M.; "Controle por Computador de Sistemas Dinâmicos"; Editora Edgard Blücher Ltda., Número de páginas: 264, São Paulo, 2ª Edição, 2000.
6. Chi-Tsong Chen; "Analog and Digital Control System Design"; Saunders Collage Publishing, 1993.
7. Chi-Tsong Chen, "Introduction to Linear System Theory", 1st ed., Holt, Rinehart and Winston, 1970.
8. B. Francis, O. Sebakhy and W. Wonham, "The internal model principle of control theory", *Automática*, vol. 12, no. 5, pp. 457-465, 1976.
9. M. Tomizuka, "Zero phase error tracking algorithm for digital control", *Trans. ASME, J. Dynam. Syst., Meas. and Control*, vol. 109, pp. 65-68, Mar. 1987.
10. M. Tomizuka, T. Tsao and K. Chew, "Analysis and synthesis of discrete-time repetitive controllers", *Trans. ASME, J. Dynam. Syst., Meas. and Control*, vol. 111, pp. 353-358, Sep. 1989.
11. T. Haneyoshi, A. Kawamura and R. Hoft, "Waveform compensation of PWM inverter with cyclic fluctuating loads", *IEEE Trans. Industry Applications*, vol. 24, no. 4, pp. 582-589, Jul/Aug 1988.
12. K. Chew and M. Tomizuka, "Steady-state and stochastic performance of a modified discrete-time prototype repetitive controller", *Trans. ASME, J. Dynam. Syst., Meas. and Control*, vol. 112, pp. 35-41, Mar. 1990.
13. Fernando Botterón, "Análise, Projeto e Implementação de um Inversor PWM Trifásico para UPS de Média Potência"; Dissertação de Mestrado submetida ao PPGEE, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Brasil, Julho 2001.
14. Botterón, F.; Pinheiro, H.; Gründling, H.A.; Pinheiro, J.R.; Hey, H.L., "Digital voltage and current controllers for three-phase PWM inverter for UPS applications", *IEEE Industry Applications IAS Annual Meeting Conf. Proc.*, vol. 4, Page(s): 2667-2674, 2001.
15. K. Zhou and D Wang, "Digital repetitive learning controller for three-phase CVCF PWM inverter", *IEEE Trans. Ind. Electron.*, vol. 48, no. 4, pp. 820-830, Aug. 2001.
16. F. Botterón, R.F. de Camargo, H.L. Hey, J.R. Pinheiro, H.A. Gründling and H. Pinheiro, "New limiting algorithms for space vector modulated three-phase four-leg voltage source inverters", *IEE Proc.-Electr. Power Appl.*, vol. 150, no. 6, pp. 733-742, Nov. 2003.
17. C. Rech, H. Pinheiro, H. A. Gründling, H. L. Hey and J. R. Pinheiro, "Comparison of digital control techniques with repetitive integral action for low cost PWM inverters", *IEEE Trans. Power Electron.*, vol. 18, no. 1, pp. 401-410, Jan 2003.
18. R. Costa-Castelló, R. Griñó and E. Fossas, "Odd-Harmonic Digital Repetitive Control of a Single-Phase Current Active Filter", *IEEE Trans. on Power Electron.*, vol. 19, no. 4, pp. 1060-1068, Jul 2004.



19. K. Zhou, K-Soon Low, S-Hie Tan, D. Wang; Y-Qiang Ye, "Odd-harmonic repetitive controlled CVCF PWM inverter with phase lead compensation", in Proc. IAS, vol. 1, pp. 177 - 182, 2004.
20. F. Botterón and H. Pinheiro, "A New Discrete-Time Voltage Controller Based on the Internal Model Principle for Three-Phase Voltage Source PWM inverters with ΔY Output Transformer" in Proc. PESC, vol. 1, pp. 2508 - 2514, 2004.
21. R. Griñó and R. Costa-Castelló, "Digital repetitive plug-in controller for odd-harmonic periodic references and disturbances", Automática, vol. 41, Issue 1, pp. 153 - 157, Jan 2005.
22. Botterón, F., "Controladores Discretos de Tensão Baseados no Princípio do Modelo Interno Aplicados a Inversores Trifásicos PWM "; Tese de Doutorado submetida aoPPGEE, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Brasil, dezembro 2005.



Uso racional y eficiente de la energía

Carga horaria: 20hs

Objetivos:

El ámbito del curso corresponde a la mirada sistémica que avizora el Uso Racional y Eficiente de la Energía (UREE). Se busca capacitar a los estudiantes en los conceptos del balance energético en la cadena de gestión de la energía: Generación, Transporte, Distribución y Consumo. La evaluación de los Recursos Naturales en un contexto de sustentabilidad, mediante un análisis de ciclo de vida. Reflexionar sobre nuestros hábitos de consumo energético para promover la consideración social. Finalmente se presentarán modelos de integración de política científico-tecnológica, sus ventajas, desafíos y casos de aplicación en Argentina. La innovación permanente en las pymes y modelos de sistemas de gestión de la innovación. Además se procurará brindar herramientas que ayuden a desarrollar proyectos en I+D en el desarrollo de nuevas tecnologías en el contexto UREE.

En este marco se pretende que los estudiantes adquieran conocimientos y habilidades necesarios para el diagnóstico y cálculo de la eficiencia energética de equipos y servicios, así como para el diseño e implantación de medidas de ahorro energético y de la mejora de la eficiencia energética en los diferentes sectores: doméstico, productivo y de servicios.

Programa analítico:

Unidad I. Introducción a las técnicas UREE

Transformaciones energéticas. Principio de conservación de la Energía. Medición de la Energía. Concepto de eficiencia. Degradación de la Energía. La Energía eléctrica. Uso eficiente de la energía. Gestión de la demanda. Problemas ambientales relacionados con la cadena de producción y el consumo de energía

Unidad II. Consumos energéticos y ambiente

Evolución en el consumo de energía y sus usos. Energía y calidad de vida. Análisis de los recursos energéticos primarios renovables y no renovables. Emisiones de gases de efecto invernadero y otros contaminantes. El calentamiento global y sus consecuencias.

Unidad III. Formas de almacenamiento y uso racional de la Energía

Almacenamiento de la energía. Almacenamiento de energía eléctrica.



Eficiencia energética en el transporte y distribución de energía. Eficiencia energética en usos residenciales y comerciales (vivienda y edificios). Eficiencia energética en actividades industriales y agrícolas.

Unidad IV. Metodologías y aplicaciones UREE

Aplicación de la metodología de auditoría energética. Información asimétrica y sistemas de etiquetados. Efecto rebote (Efecto Jevons). Diagnóstico y auditoría energética. Balances energéticos. Desarrollo sobre normativa de Sistemas de Gestión Energética - Antecedentes históricos. La eficiencia energética y sus beneficios económicos y ambientales a nivel global. El enfoque de la mejora continua en un Sistema de Gestión Energética.

Unidad V. Desarrollo Tecnológico, Innovación y Programas UREE

Modelo de política científico-tecnológica y articulación entre: el estado, el científico-tecnológico y el productivo. Políticas públicas y la articulación científica y tecnológica en Argentina. Desarrollo tecnológico (DT) e innovación I+D+i. Gestión del conocimiento. Articulación público-privada. Modelos de gestión continua de la innovación. Innovación abierta.

Legislación Argentina, estado actual de los programas UREE en Argentina nacionales y provinciales. Experiencias exitosas y no exitosas de programas de eficiencia energéticas en el mundo.

Metodología de trabajo:

- Foros proactivos de discusión propuestos por el docente.
- Consultas al docente a través de e-mail o chat.
- Materiales de lectura complementarios.
- Actividades individuales y/o grupales de aplicación práctica.

Metodología de evaluación: Aprobación de evaluaciones integradoras finales por módulo sobre la base de trabajos prácticos de aplicación de los conocimientos adquiridos.

Referencias:

1. Escenarios energéticos para la Argentina (2013-2030) con políticas de eficiencia. http://awsassets.wwfar.panda.org/downloads/escenarios_energeticos_para_la_argentina_2013_2030_con_politicas_de_eficiencia.pdf
2. Norma IRAM-ISO 50001. Sistemas de gestión de la energía.





3. Núcleo Socio Productivo Estratégico UREE. Plan Argentina innovadora 2020.
<http://www.argentinainnovadora2020.mincyt.gob.ar/wp-content/uploads/2013/03/UREE2016.pdf>
4. <https://www.minem.gob.ar/www/835/25608/programas.html>
5. PROGRAMA PROVINCIAL ENERGÍA EFICIENTE (PROPEE).
<http://www.cba.gov.ar/programa-provincial-energia-eficiente/>
6. <https://www.minem.gob.ar/planeamiento-energetico/eficiencia-energetica.html>
7. <https://www.minem.gob.ar/planeamiento-energetico/eficiencia-energetica.html>
8. <https://www.minem.gob.ar/consejos-eficiencia/>
9. <http://www.ub.edu/prometheus21/articulos/energia.pdf>
10. http://www.empresaeeficiente.com/wp-content/uploads/2016/01/guia_20-casos-practicos-de-la-eficiencia-energetica-en-espana.pdf
11. POLÍTICAS PÚBLICAS EN CIENCIA, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN PRODUCTIVA: LOGROS Y RESULTADOS. 2015.

[Handwritten mark]



Anexo II:

Reglamento del examen de idioma Inglés de la carrera "Doctorado en Energías Renovables"

- 1) El doctorando deberá aprobar un examen de lecto-comprensión escrito Inglés - Español y Español - Inglés; a nivel de comprensión de textos científico - técnico. El examen consistirá de dos partes:
 - a) La traducción del Inglés al Español de un texto científico del área de la carrera de doctorado (aproximadamente 500 palabras).
 - b) La traducción del Español al Inglés de un resumen técnico del área de la carrera de doctorado (aproximadamente 100 palabras).
- 2) El doctorando deberá aprobar el examen de idioma en el curso de la carrera. Se establecerá una sola fecha y tribunal en el año en curso. Los doctorandos deberán inscribirse con 10 días hábiles de antelación a la fecha de examen fijada.
- 3) Los tribunales para el examen de idioma Inglés serán designados por el Comité Académico de la carrera, y estarán constituido por profesores de la UNCA, UNC y UNDEF, con sus respectivos suplentes. Los profesores que integren el tribunal deberán acreditar actividad en el posgrado. Tendrán a cargo la confección y evaluación de los exámenes y el labrado de las actas correspondientes.
- 4) El examen de idioma Inglés será calificado como "Aprobado" o "No Aprobado".



Reglamento de la Carrera de Doctorado en Energías Renovables

Introducción: La Carrera de Doctorado en Energías Renovables tiene como finalidad la capacitación para la investigación y desarrollo de los conocimientos en el campo de las Ciencias Exactas y Naturales e Ingenierías que impliquen avances importantes y originales, cuya excelencia teórica y práctica constituya una contribución al progreso del conocimiento científico-tecnológico y un aporte significativo a los requerimientos de la sociedad, en particular todo lo referente con formas limpias para el almacenamiento, transporte y aprovechamiento energético. El grado de Doctor será otorgado a personas que hubiesen demostrado comprensión profunda de la disciplina elegida, como así también capacidad para hacer contribuciones originales al conocimiento en el área respectiva. El grado de Doctor certificará aptitud crítica en asuntos académicos, creatividad, iniciativa y habilidad para emprender investigaciones científicas-tecnológicas, y la capacidad y el estilo indispensables para la comunicación del conocimiento.

CAPITULO I: TITULO A OTORGAR y REGLAMENTO

El título de Doctor en Energías Renovables será otorgado por la Universidad Nacional de Catamarca (UNCA), la Universidad Nacional de Córdoba (UNC) y la Universidad para la Defensa (UNDEF) en forma conjunta, de acuerdo a lo dispuesto en el presente Reglamento. Este título tendrá valor académico, no habilitando para ejercicio profesional alguno en el país.

Artículo 1º

Participarán de la Carrera del Doctorado en Energías Renovables las siguientes Unidades Académicas:

- * Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UNCA
- * Facultad de Ciencias Químicas de la UNC
- * Facultad de Matemáticas, Astronomía, Física y Computación de la UNC
- * Centro Regional Universitario Córdoba - IUA de la UNDEF

Artículo 2º

Para acceder al título de Doctor en Energías Renovables, el aspirante deberá cumplir con los siguientes requisitos:

1. Reunir una cantidad mínima de créditos obtenidos a través de la aprobación de los cursos y cumplir con las actividades académicas conforme a lo estipulado en el Reglamento de la carrera de Doctorado en Energías Renovables.
2. Presentar en forma escrita y oral, los avances realizados en el desarrollo de la tesis ante la Comisión Asesora de Tesis con una frecuencia de al menos una reunión anual.



3. Aprobar el examen de inglés según Anexo II del Plan de Estudio de la Carrera.
4. Realizar un trabajo de Tesis que consistirá en un trabajo de investigación individual y original sobre un tema de relevancia académica en el campo de las Ciencias Exactas, Naturales o Ingenierías, que constituya un aporte significativo a la producción del conocimiento relacionado al estudio y desarrollo de energías renovables de diversa índole. Deberá ser una propuesta original que se base en un exhaustivo relevamiento de la bibliografía en la materia, con un consistente y actualizado marco teórico y metodológico. Deberá estar estructurada sobre la base de una rigurosa metodología de trabajo científico bajo la tutela de su Director de Tesis.
5. Defender en forma pública su Tesis Doctoral, que deberá ser aprobada por un Tribunal designado a tal efecto.

CAPÍTULO II: ESTRUCTURA Y ORGANIZACIÓN DE LA CARRERA DE DOCTORADO

Artículo 3º : La Carrera de Doctorado en Energías Renovables tendrá un Director, un Director Alterno y un Comité Académico (CA).

Artículo 4a: El Comité Académico estará integrado por dos miembros titulares y un suplente por cada unidad académica participante del proyecto y por el Director de la Carrera que además presidirá dicho comité. Al menos uno de los miembros de cada unidad académica deberá ser profesor regular.

Artículo 4b: El Director, el Director Alterno y los miembros del Comité Académico serán designados por el Honorable Consejo Directivo (HCD) de la Unidad Académica sede Administrativa atendiendo a las propuestas de los organismos de posgrado de las UA intervinientes y durarán 3 años en sus funciones y podrán ser designados nuevamente por otro período consecutivo.

En caso de que el Director propuesto sea un miembro del CA se deberá designar un reemplazante de la misma facultad.

El Director Alterno será propuesto por el CA, deberá ser parte de él y además pertenecer a una Institución diferente de la que provenga el Director.

Cláusula Transitoria: A los fines de evitar la caducidad simultánea de los mandatos del Director y del Director Alterno, este último será elegido, en el primer mandato, por un período de 2 (dos) años, computándose este período como de 3 (tres) años a los fines de futuras postulaciones.

Artículo 4c: Son requisitos para ser Director y Director alternativo de la Carrera poseer título de



Doctor, ser Profesor regular de alguna de las Universidades intervinientes. Además, deberá pertenecer a la Categoría I o II en el Programa de Incentivos Docentes, ser miembro de la Carrera del Investigador del CONICET (categoría no inferior a Independiente) o ser Clase C o superior en el Régimen para el Personal de Investigación y Desarrollos de las Fuerzas Armadas (RPIDFA). Asimismo, deberá acreditar reconocida trayectoria docente, producción científica en el área del Doctorado y experiencia en formación de recursos humanos.

Cláusula transitoria: A lo fines de asegurar que cada Institución participante en el doctorado pueda proponer Director o Director alterno, por un período de 5 años los requisitos para ser Director y Director alterno de la Carrera serán los mismos que los requeridos para ser miembro del Comité Académico

Artículo 4d: Son requisitos para ser miembro del Comité Académico tener título de doctor, ser o haber sido profesor regular por concurso de alguna de las Universidades intervinientes y además cumplir con al menos una de las siguientes condiciones:

- a) Ser Investigador Adjunto o de mayor jerarquía en la Carrera del Investigador científico del CONICET.
- b) Estar categorizado en el Programa Nacional de Incentivos con categoría III o mayor.
- c) Clase D o superior en el Régimen para el Personal de Investigación y Desarrollos de las Fuerzas Armadas (RPIDFA)
- d) Poseer reconocida trayectoria docente y de investigación en la temática de la carrera y experiencia en la formación de recursos humanos en Carreras de Posgrado.

Artículo 4e: Los estudiantes del doctorado elegirán anualmente un representante de los doctorandos que participará en reuniones del Comité Académico y sólo lo hará con voz y sin voto.

Artículo 5º

Serán funciones y atribuciones del Director de la Carrera de Doctorado:

- a) Planificar y supervisar las actividades académicas de la Carrera.
- b) Convocar y presidir las reuniones del Comité Académico.
- c) Representar a la Carrera de Doctorado ante Instituciones oficiales o privadas, cuando corresponda, sin desmedro de las atribuciones del Secretario de Posgrado de la Universidad/Facultad sede administrativa y con el acuerdo de éste.



- d) Producir información institucional que facilite la autoevaluación periódica de la carrera de Doctorado con participación de profesores y doctorandos.
- e) Elevar a las autoridades de las UA intervinientes una planificación anual del presupuesto estimativo, el orden de prioridades sobre cómo se afectarán los recursos y, cuando correspondiere, las tasas retributivas de servicio. Ésta tarea requerirá el asesoramiento y aval del Comité Académico.
- f) Co-gestionar el presupuesto de la Carrera de Doctorado con el área económica-financiera de la Facultad sede administrativa.

Serán funciones del Director Alterno reemplazar al Director en caso de ausencia.

Artículo 6º

Serán funciones del Comité Académico del Doctorado

- a) Analizar las solicitudes de admisión a la Carrera de Doctorado, considerando el cumplimiento de requisitos básicos (título de grado, promedio, antecedentes del Director o Directores, pertinencia del plan presentado y la justificación de una dirección conjunta si correspondiere) para luego proponer al H. Consejo Directivo de la facultad sede, la admisión del postulante a la carrera del Doctorado en Energías Renovables.

Cuando lo considere necesario podrá recomendar la realización de cursos propedéuticos o nivelatorios para complementar la formación del aspirante.

- b) Proponer los miembros que integran la Comisión Asesora de Tesis de cada doctorando.
- c) Colaborar en el seguimiento académico de los doctorandos, controlando el cumplimiento de las obligaciones académicas en tiempo y forma, y asignando los créditos de cursos específicos y otras actividades.
- d) Proponer los miembros del Tribunal para la evaluación de la Tesis.
- e) Proponer el Evaluador externo a las Universidades intervinientes que integra el Tribunal para la evaluación de la Tesis.
- f) Evaluar, aceptando o rechazando nuevas propuestas de cursos de posgrado a dictar, adjudicando en cada caso los créditos correspondientes.
- g) Reconocer las equivalencias y/o acreditación de cursos cuando corresponda adjudicando en cada caso los créditos correspondientes..
- h) Recomendar al Director de la Carrera del Doctorado las modificaciones del plan de estudios, del reglamento e instructivos sobre aspectos específicos que considere pertinentes.
- i) Colaborar con el Director en la propuesta curricular, selección de profesores y demás actividades académicas relacionadas con la Carrera.
- j) En caso de que exista asignación de estipendios por parte de instituciones externa a éste doctorado y además no tengan criterios propios de selección, el CA deberá establecer mecanismos



para la asignación de las mismas para los/las doctorandos/as.

Artículo 7º

El Comité Académico sesionará como mínimo 3 veces al año, convocado por el Director de la Carrera de Doctorado, quien remitirá a sus miembros el Orden del Día correspondiente con una antelación no menor a cinco días hábiles a la fecha programada para esta reunión. Las actuaciones de cada reunión del Comité Académico quedarán registradas en un Libro de Actas, cada una refrendada por los miembros presentes en la reunión con la posibilidad de firmar el acta en disidencia explicando los motivos.

Sus decisiones serán adoptadas por mayoría simple de votos de los presentes, requiriéndose un quorum mínimo de la mitad más uno del Comité Académico. En caso de empate el voto del Director se contabilizará dos veces.

Artículo 8º

El doctorado en Energías Renovables tendrá su primer sede administrativa en la FACEN de la UNCA, la que será responsable de la presentación de la solicitud de acreditación y de toda la comunicación con el Ministerio de Educación de la Nación y con cualquier otro ente público o privado, nacional o extranjero, pertinente a los fines de las actividades específicas del Doctorado. Además se encargará de la admisión de estudiantes, matriculación anual, inscripción para exámenes, promoción y titulación. El Comité Académico considerará la conveniencia de rotar la sede administrativa a solicitud de alguna de las Facultades participantes, debiendo permanecer dicha sede por un periodo de al menos 5 años en sus funciones.

CAPÍTULO III: DIRECTORES DE TESIS

Artículo 9º

Cuando el plan de trabajo sea multidisciplinario o cuando el postulante no resida en el mismo lugar que el Director, de común acuerdo con el director, el postulante podrá proponer un Co-Director de Tesis. En todos los casos, los Directores y/o Co-Directores de Tesis deberán poseer grado académico de Doctor. Serán designados por el HCD de la facultad sede a propuesta del Comité Académico, pudiendo dirigir 5 (cinco) tesis como máximo. Podrán ser Directores o Co-Directores de Tesis:

a) Profesores Regulares, Eméritos o Consultos, miembros de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET o RPIDFA. Profesores Interinos de las Facultades intervinientes cuando sus antecedentes, condiciones y circunstancias así lo justifiquen.

Artículo 10º



Es responsabilidad del Director de Tesis:

- a) Convocar y presidir las reuniones anuales de la Comisión Asesora de Tesis.
- b) Elaborar, en forma conjunta con el postulante, el plan de trabajo para la Tesis.
- c) Asesorar y dirigir al Tesista, manteniendo un contacto permanente durante todo el desarrollo de su trabajo.
- d) Orientar al doctorando acerca de los métodos científicos e instrumentos de investigación más adecuados y oportunos para el mejor desarrollo de la investigación y la elaboración de la Tesis.
- e) Supervisar el cumplimiento del presente Reglamento por parte del doctorando y avalar sus presentaciones ante la Carrera del Doctorado.
- f) Proveer los medios necesarios para que el Tesista pueda desarrollar su trabajo.
- g) Dirigir o coordinar cursos de Doctorado al menos una vez cada cinco (5) años.

Es responsabilidad del Co-Director de Tesis:

- a) Colaborar en la elaboración del Plan de Trabajo conjuntamente con el postulante y el Director de Tesis.
- b) Asesorar al Tesista, manteniendo un contacto permanente durante todo el desarrollo de su trabajo.
- c) Colaborar en la provisión de los medios necesarios para que el Tesista pueda desarrollar su trabajo.

Artículo 11º

En caso de preverse ausencia del Director de Tesis por un período entre 6 y 12 meses, la Comisión Asesora de Tesis evaluará junto con el Tesista la situación y de considerarlo necesario, solicitará al HCD, con la debida antelación y de común acuerdo, su reemplazo por el tiempo que dure su ausencia, proponiendo a un suplente que actuará como Director. En caso de existir un Co-Director de Tesis residente en la ciudad donde el doctorando realice sus actividades, éste cumplirá transitoriamente las funciones de Director por un período no superior a un (1) año.

En caso de renuncia o impedimento del Director de Tesis para cumplir sus funciones por un período mayor de un (1) año, la Comisión Asesora de Tesis evaluará junto con el Tesista la situación y propondrá al HCD la designación de un nuevo Director.

CAPÍTULO IV: COMISIÓN ASESORA de TESIS

Artículo 12º

La Comisión Asesora de Tesis será designada por el HCD de la UA sede administrativa y estará constituida por tres integrantes: El director de Tesis, que presidirá dicha Comisión, el Co-Director



si lo hubiese y los otros dos miembros deberán ser propuestos por el Comité Académico. Se sugiere que los miembros de la Comisión Asesora de Tesis provengan de al menos dos UA diferentes.

Podrán ser miembros de la Comisión Asesora de Tesis las personas que de acuerdo con este Reglamento estén en condiciones de ser Directores o Co-Directores de Tesis.

Artículo 13º

En caso de ausencia temporal o permanente de alguno de los miembros de la Comisión Asesora de Tesis se aplicarán los mismos criterios establecidos para ausencia del Director. La Comisión Asesora de Tesis deberá reunirse con la presencia de por lo menos la mitad más uno de sus miembros.

Artículo 14º

Son funciones de la Comisión Asesora de Tesis:

- a) Evaluar al menos una vez por año calendario la marcha del trabajo de investigación, cursos y docencia realizados.
- b) Advertir y aconsejar al Tesista cuando su rendimiento no sea satisfactorio. Si el Tesista ha sido advertido por dos (2) períodos consecutivos de que su labor no es satisfactoria, la Comisión Asesora de Tesis podrá solicitar al comité Académico que sea apartado de la Carrera Doctoral.
- c) Poner a consideración del Comité Académico sobre los cursos que deberá tomar y aprobar el doctorando.
- d) Confeccionar un acta en cada reunión en la que constaran los avances alcanzados por el Tesista, los cursos que haya tomado en el período, los cursos a realizar, las tareas docentes, otras actividades científicas y si la labor ha sido satisfactoria. En caso de que la labor haya sido considerada insatisfactoria deberá explicarse por escrito la advertencia correspondiente realizada al Tesista, según versa el inciso b) de este artículo. El Acta deberá ser refrendada por todos los miembros presentes de la Comisión Asesora, en conformidad o desacuerdo justificado. Una copia del acta, con rúbricas originales, deberá ser remitida al Comité Académico quien tomará conocimiento de la misma y la derivará al área o escuela de posgrado de la Facultad sede a los fines de ser incorporada al legajo del tesista.
- e) Asesorar al Tesista cuando éste lo requiera, en todo lo relacionado con su trabajo de Tesis.

INSCRIPCIÓN

Artículo 15º



Podrán aspirar al título de Doctor en Energías Renovables los graduados de carreras de no menos de cuatro años de duración en Ciencias Exactas y Naturales, Ingenierías o áreas relacionadas con a los temas de interés de la carrera. Proveniente de las Universidades intervinientes, o de otras Universidades Nacionales, Provinciales o Privadas acreditadas por los organismos pertinentes, o de Universidades extranjeras de jerarquía académica reconocida por autoridad competente de su país de origen.

Artículo 16º

El trámite de inscripción a la carrera de Doctorado en Energías Renovables deberá realizarse dentro de las fechas y plazos establecidos por las autoridades de la carrera, por expediente iniciado en Mesa de Entradas de la Unidad Académica sede administrativa a través de una solicitud de admisión dirigida a la máxima autoridad de la sede administrativa, en la que conste la siguiente información:

a) Proyecto de Tesis Doctoral, que deberá estar redactado en un máximo de cuatro (4) páginas, sin considerar las referencias bibliográficas. Deberá contener, como mínimo, la siguiente información:

- Título del proyecto.
- Antecedentes sobre el tema.
- Plan de trabajo de la Tesis, incluyendo formulación del problema, objetivo/s, procedimientos metodológicos.
- Relevancia del proyecto.
- Justificación de la posibilidad de su materialización.
- Referencias bibliográficas.

b) Nombre y currículum vitae del Director de Tesis propuesto y la constancia escrita de su compromiso a desempeñar tal función, de acuerdo con las exigencias previstas en el Reglamento de la carrera de Doctorado en Energías Renovables.

c) Cuando el plan de trabajo de la Tesis sea multidisciplinario o cuando el postulante no resida en el mismo lugar que su Director, y de común acuerdo con el Director, el postulante podrá proponer un Co-Director de Tesis. En tal caso dicha constancia deberá estar avalada también por el Co-Director de Tesis.

d) Grupo de investigación y lugar dónde se realizará el trabajo de Tesis. En todos los casos, la solicitud deberá estar acompañada del visto bueno de la autoridad del Departamento o Unidad Académica donde se propone desarrollar la Tesis Doctoral.

e) Currículum Vitae nominal del aspirante con certificaciones de tesis y cursos aprobados, publicaciones y participación en equipos de investigación.



- f) Certificado analítico original de calificaciones obtenidas incluyendo aplazos.
 - g) Copia autenticada del título de grado.
 - h) Domicilio legal del postulante, del Director y del Co-Director, cuando corresponda.
- Para el caso de solicitantes extranjeros, los requisitos adicionales se detallarán en las Secretarías Académicas de la Universidades intervinientes.

Para el caso de solicitantes extranjeros, los requisitos adicionales se detallan en las secretarías Académicas de la Universidades intervinientes.

ESTRUCTURA CURRICULAR

Artículo 17º

La carrera de Doctorado se desarrolla en forma semi-estructurada y en modalidad presencial. Su estructura comprenderá la ejecución de un trabajo de investigación original (Tesis Doctoral) en un grupo de investigación establecido y un programa de estudios específicos (cursos de Doctorado). Los cursos de Doctorado cumplirán las funciones de impartir: i) conocimientos generales y avanzados en el área de Energías Renovables y ii) conocimientos específicos necesarios para el desarrollo de la Tesis Doctoral.

Artículo 18º

La tesis consistirá en un trabajo de investigación individual sobre un tema de relevancia académica en el campo de las Ciencias Exactas y Naturales e Ingenierías que constituya un aporte significativo a la producción del conocimiento relacionado al estudio y desarrollo de energías renovables de diversa índole. Deberá ser una propuesta original que se base en un exhaustivo relevamiento de la bibliografía en la materia, con un consistente y actualizado marco teórico y metodológico. Deberá estar estructurada sobre la base de una rigurosa metodología de trabajo científico.

Artículo 19ºa

Durante la carrera el Tesista deberá reunir un mínimo de 10 créditos mediante la aprobación de cursos específicos. Cada crédito equivale a 20 hs de actividad en el aula. Un curso no puede otorgar más de 3 créditos. Al menos un curso deberá ser realizado en otra UA a la cual tiene lugar de trabajo el doctorando. El curso de formación general no otorga créditos.

El Comité Académico podrá reconocer el curso de formación general y hasta 3 créditos para los cursos de doctorado específicos realizados con una antelación no mayor de 3 (tres) años de la admisión a la Carrera Doctoral a sugerencia de la Comisión Asesora de Tesis.



Artículo 19ºb

Para los cursos organizados y dictados por otros programas de las UA participantes, el comité académico deberá realizar un análisis de la pertinencia para el Doctorado. Para los cursos de otras instituciones, el Tesista deberá presentar junto con la solicitud, todo elemento importante a los efectos de su reconocimiento. Los docentes responsables deberán tener un grado académico de doctor o en condiciones excepcionales, mérito sobresaliente en el área disciplinar. Sólo se aceptarán cursos de formación específica con evaluación que deberá ser con una calificación no inferior a siete (7) puntos en la escala de cero (0) a diez (10).

Artículo 19ºc

Si la Comisión Asesora de Tesis considera que el curso es apropiado, solicitará al Comité Académico su categorización como curso de formación válido para el Doctorado. Cuando el Tesista haya aprobado el curso, el Comité Académico procederá a asignar los créditos que considere pertinente.

Artículo 20º

Los doctorandos a partir del 2do año deberán realizar una presentación de los avances de sus estudios en una reunión anual conjunta organizada por el CA. Ante la imposibilidad de asistir a la reunión anual, el CA contemplará una presentación individual. Este encuentro complementa la reunión del Doctorando con su comisión asesora.

ESCRITURA DE TESIS

Artículo 21º

La Carrera culminará con un trabajo final individual escrito en forma de tesis que deberá ser confeccionado en lengua española o portuguesa.

a) Concluido el trabajo de investigación y todos los requisitos que establece la presente reglamentación la Comisión Asesora de Tesis aconsejará al Tesista la redacción del trabajo de Tesis. Dicha autorización deberá constar en forma expresa en el Acta de la reunión la Comisión Asesora de Tesis.

b) Una vez concluida la redacción de la tesis, el Tesista solicitará por nota avalada por el director de tesis, la designación de los miembros del Jurado evaluador por resolución del HCD, realizando la entrega de 3 ejemplares impresos

JURADO EVALUADOR

Artículo 22º



El jurado evaluador de tesis estará conformado por un miembros de la Comisión Asesora de Tesis (No podrá ser el Director/Co-Director) y otros dos miembros propuestos que no formen parte de la Comisión asesora y de los cuales uno deberá ser externo a las instituciones participantes, todos con sus respectivos suplentes.

Artículo 23º

El Jurado Evaluador será propuesto por el Comité Académico de la Carrera de Doctorado. Cada miembro del Jurado deberá cumplir con los requisitos exigidos para ser Director de Tesis Doctoral y poseer reconocidos antecedentes en el tema de la Tesis, o en temas afines. Los miembros propuestos para el Jurado Evaluador dispondrán de un plazo de cinco (5) días a partir de recibida la invitación a participar del proceso de evaluación, para comunicar su aceptación.

La designación del Jurado se efectuará dentro de los treinta (30) días corridos a partir de la fecha de recepción de los ejemplares en el área administrativa y la solicitud de integración del Jurado Evaluador de Tesis. Una vez efectivizada la designación del Jurado, ésta será notificada a sus miembros, al doctorando, a su Director de Tesis y al Co-Director, si correspondiera.

Artículo 24º

Los miembros del Tribunal evaluador de Tesis podrán ser recusados por el doctorando dentro de los cinco (5) días hábiles a partir de la fecha de la notificación de su designación. Las recusaciones sólo podrán estar basadas en causales establecidas en el Código de Procedimiento Civil y Comercial de la Nación, en lo que se refiere sobre recusación de jueces. Formulada la recusación, se correrá vista por el término de cinco (5) días hábiles a los miembros recusados, a fin de que formulen las apreciaciones que estimen corresponder. En resolución fundada el Director de la Carrera (previa consulta a los miembros de CA) resolverá la cuestión en un término no mayor de diez (10) días hábiles.

EVALUACIÓN DE MANUSCRITO DE TESIS

Artículo 25º

El Jurado evaluará el trabajo de Tesis en un plazo no superior a los treinta (30) días corridos desde la recepción de los ejemplares, debiendo remitir sus dictámenes al Director de la Carrera, por escrito y en forma individual. Dentro de los cinco (5) días hábiles posteriores, éste informará al alumno de doctorado sobre los resultados de la evaluación del manuscrito. Si el incumplimiento de los plazos establecidos por parte de un miembro del Jurado deriva en un perjuicio para alguna de las partes, el Comité Académico podrá, a pedido de los afectados, o bien de oficio, decidir el reemplazo de dicho integrante.



Artículo 26º

El dictamen escrito de cada miembro del Jurado consistirá en la fundamentación de su opinión acerca de la calidad del trabajo de Tesis, teniendo en cuenta la originalidad, la importancia y/o la repercusión de los resultados, la adecuación de la metodología empleada y de la revisión bibliográfica, así como la claridad y corrección de la presentación. El dictamen no incluirá una calificación, pero deberá explicitar si el trabajo de Tesis debe ser:

(I) Aceptado sin cambios, o con correcciones menores, expresando su aval para proceder a la defensa oral,

(II) Aceptado devuelto para correcciones que deban ser realizadas antes de la defensa,

(III) No aceptado con correcciones mayores debiendo señalar claramente las objeciones y proponer las correcciones y/o modificaciones a efectuar. El mismo será remitido al alumno de doctorado, quien podrá solicitar aclaraciones del mismo en forma personalizada. El alumno de doctorado tendrá hasta seis (6) meses de plazo para presentar la versión definitiva de la Tesis corregida.

IV) Rechazado. En el caso de ser rechazado el dictamen deberá fundamentar claramente las causales del rechazo. Cada dictamen deberá ser comunicado a los restantes miembros del jurado. En el caso de que alguno de los miembros del tribunal realice un dictamen de No aceptado con correcciones mayores (III), el alumno deberá elevar una nueva versión de tesis. Esta versión corregida será nuevamente evaluada por el Jurado, quien emitirá un nuevo dictamen en un plazo no mayor a treinta (30) días corridos, explicitando si el manuscrito es aceptado, expresando su aval para proceder a la defensa oral o rechazado. Los miembros del tribunal podrán emitir dictamen en forma individual o conjunta para la cual se podrá utilizar medios de comunicación virtuales.

Si el trabajo de Tesis resultara rechazado por la mayoría de los miembros del Jurado de la evaluación del manuscrito, se asentará el dictamen "Reprobado" en un Acta y se notificará del mismo al alumno de doctorado.

El alumno podrá solicitar ampliación de dictamen en los casos (III y IV) y solicitar intervención del CA en caso de ser necesario. En casos excepcionales el CA podrá designar un nuevo tribunal.

Artículo 27º

Si los integrantes del Jurado por mayoría hubiera considerado que el trabajo de Tesis debe ser aceptado, el Director de la Carrera acordará con el Jurado la fecha para efectuar la defensa oral y pública de la Tesis, con no menos de cinco (5) días hábiles de antelación, y lo dará a publicidad.

EVALUACIÓN FINAL. DEFENSA ORAL

Artículo 28º



La carrera culminará con la presentación oral y pública del trabajo de tesis, realizada también en lengua española o portuguesa y concretada en alguna de las sedes físicas pertenecientes a las UA intervinientes. Se admitirá además el uso de medios tecnológicos sincrónicos que garanticen la comunicación directa y simultánea para la actuación del Tribunal y efectivización de la defensa. Si por razones de fuerza mayor hubiera solamente dos de los miembros del Jurado, éstos tendrán en cuenta para la evaluación final el dictamen que el miembro ausente envió oportunamente por escrito y que se leerá en su representación frente al resto del Jurado una vez finalizada la defensa oral.

El Director de Tesis y/o el Co-Director podrán, durante la defensa pública del trabajo de Tesis, intervenir (si el jurado lo considera pertinente) para ampliar los aspectos de la presentación que así lo requieran.

Artículo 29º

Una vez aceptado el manuscrito de Tesis y realizada la defensa oral y pública, el Jurado decidirá por mayoría la calificación del trabajo de Tesis sobre la base de una escala de Bueno, Distinguido o Sobresaliente. Las equivalencias de esta escala respecto de la escala 0-10 son: Bueno: 7, Distinguido: 8-9, Sobresaliente: 10.

La calificación se asentará en un Acta ad hoc que deberá ser firmada por todos los integrantes del Jurado.

Artículo 30º

El alumno de doctorado podrá publicar aspectos parciales de su trabajo de Tesis antes de que éste sea expuesto en la defensa oral, conforme lo prevé la ley 26.899.

Artículo 31º

La versión final de la tesis se deberá realizar en 4 ejemplares impresos y 4 en soporte digital, debiendo cumplir con las formalidades establecidas por la reglamentación pertinente de la UA sede administrativa.

DURACIÓN DE LA CARRERA, LICENCIAS Y VIAJES

Artículo 32º

Las fechas de iniciación y finalización de la Carrera de Doctorado en Energías Renovables serán las correspondientes a la admisión del postulante y a la de la defensa oral de la Tesis Doctoral, respectivamente. La duración de la Carrera no podrá ser inferior a los 3 (tres) años ni superior a los cinco (5) años calendarios. Si dentro del plazo máximo no se hubiera completado las exigencias



de la Carrera, el interesado podrá solicitar una prórroga anual y como máximo 3 prórrogas. Si el trabajo de tesis no se presentara dentro de los plazos antes establecidos el doctorando será dado de baja de la Carrera.

Artículo 33º

El doctorando podrá solicitar licencia en la Carrera del Doctorado por un plazo total acumulado no mayor a un (1) año, por motivos justificados. Durante el lapso que dure la licencia quedarán suspendidos los plazos y las obligaciones académicas y administrativas que emanan del presente Reglamento, los cuales se reanudarán desde la fecha de reincorporación.

Artículo 34º

El doctorando podrá realizar viajes en el marco del proyecto por tiempos menores a los seis meses solo con previa autorización de su director y, si correspondiera, de su codirector. Los viajes por tiempos de entre seis y doce meses deben ser previamente autorizados, además del director y, si correspondiera, codirector, por la comisión asesora. Para tramitar dicha aprobación el doctorando deberá presentar un plan de trabajo acorde al tiempo de duración del viaje y una carta de invitación emitida por el jefe de grupo donde el doctorando realizará sus actividades durante el viaje, donde se indique el nombre del profesional que cumplirá la función de director durante el tiempo de estadía del doctorando en dicho lugar de trabajo. Deberá presentar también un curriculum vitae resumido (no más de 5 páginas) del director propuesto para la estadía.

DE FORMA

Artículo 35º

Todas las situaciones no previstas por el presente Reglamento serán consideradas por las autoridades de la Carrera Doctorado y resueltas por el HCD de la UA sede Administrativa de la misma.




Lic. PATRICIA EVANGELINA CAFFETARO
SEC. ACADEMICA Y DE POSGRADO
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CATAMARCA

ING. AGRIM. FLAVIO SERGIO FAMA
RECTOR
UNIV. NAC. DE CATAMARCA