

## CURRICULUM VITAE - BEATRIZ DEL LUJÁN IRIGOYEN

Departamento de Ingeniería Química–FIUBA.  
Instituto de Tecnologías del Hidrógeno y Energías Sostenibles, ITHES (UBA–CONICET).  
Intendente Güiraldes 2160, Pabellón de Industrias. (1428) Ciudad Universitaria, C.A.B.A.  
Teléfono laboral: (+54) (011) 5285-0365;  
E-mail: [birigoyen@fi.uba.ar](mailto:birigoyen@fi.uba.ar)

### INFORMACIÓN ACADÉMICA

#### *Títulos de posgrado*

- **Doctora en Ingeniería Química**  
Universidad Nacional del Sur (2004)
- **Magister en Ingeniería Química**  
Universidad Nacional del Sur (1998)

#### *Título de grado*

**Ingeniera Química**  
Universidad Nacional del Sur (1982)

### CARGOS ACTUALES

- **Profesor Asociado Regular, Dedicación Exclusiva**  
Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires
- **Directora de la Carrera de Ingeniería Química (Abril/16 – Continúa)**  
Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires

### PROGRAMA DE INCENTIVOS

Docente-Investigador **Categoría I** en el marco del Programa de Incentivos (Ministerio de Cultura y Educación).

### AREA DE ACTUACIÓN EN I+D

Modelado de materiales y sistemas catalíticos mediante cálculos mecano-cuánticos basados en la teoría del funcional de la densidad (*DFT*): caracterización teórica de la estructura geométrica y electrónica y de las propiedades de catalizadores óxidos, estudios de mecanismos de reacción.

- Catálisis heterogénea: reformado de CH<sub>4</sub>, WGS, conversión de CO y CO<sub>2</sub>, valorización de glicerol.
- Diseño computacional de nanotubos de carbono dopados para almacenamiento de H<sub>2</sub>.
- Estudio teórico de remoción de fenoles de efluentes industriales.

### PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

44 trabajos publicados en revistas indexadas de relevancia internacional (Q1). 2 trabajos publicados en revistas indexadas de relevancia nacional. 1 capítulo de libro de editorial internacional. 75 publicaciones en Actas y Proceedings de Congresos Nacionales e Internacionales, con referato. 101 trabajos presentados en reuniones nacionales e internacionales.

#### **Publicaciones SCI. Revistas internacionales, con referato**

- 1- "The location of a hydrogen atom and hydrogen molecules in BCC-Fe. An ASED-MO approach"  
B. Irigoyen, R. Ferullo, N. Castellani, A. Juan

Modelling Simulation Materials Science. Eng. IOP Publishing, United Kingdom. ISSN: 0965–0393. 1995, **3**, 319–329.

**2-** “The interaction of hydrogen with a Fe vacancy: a molecular orbital simulation”

B. Irigoyen, R. Ferullo, N. Castellani, A. Juan

Journal of Physics D: Applied Physics. IOP Publishing, United Kingdom. ISSN: 0022–3727. 1996, **29**, 1306–1309.

**3-** “An experiment on the liquid-vapor equilibrium for water”

S. Gesari, B. Irigoyen, A. Juan

American Journal of Physics. American Association of Physics Teachers. United States of America. ISSN: 0002–9505. 1996, **64**(9), 1165–1168.

**4-** “Estudio estructural del MoO<sub>3</sub> y sus planos cristalinos”

S. Gesari, B. Irigoyen, A. Juan

Química Nova. Sociedade Brasileira de Química. Brasil. ISSN: 0100–4042. 1997, **20**(1), 99–102.

**5-** “A molecular orbital study of H interaction with an edge dislocation in Fe bcc”

B. Irigoyen, R. Ferullo, N. Castellani, A. Juan

Modelling Simulation Materials Science Eng. IOP Publishing, United Kingdom. ISSN: 0965–03935. 1997, **5**, 357–363.

**6-** “Methane oxidations reactions on MoO<sub>3</sub>(100)-A theoretical study”

B. Irigoyen, A. Juan, N. Castellani

J. Molecular Catalysis A. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 1381-1169. 1998, **129**, 297–310.

**7-** “The location of atomic hydrogen in an edge dislocated BCC-Fe. A molecular orbital approach”

B. Irigoyen, S. Gesari, A. Juan

Journal of Physics D: Applied Physics. IOP Publishing, United Kingdom. ISSN: 0022–3727. 1998, **31**, 2179–2183.

**8-** “CH<sub>3</sub> and CH<sub>2</sub> oxidation reactions on MoO<sub>3</sub>(100): analysis of the electronic structure”

B. Irigoyen, A. Juan, N. Castellani

Journal of Catalysis. Academic Press. United Kingdom. ISSN: 0021–9517. 2000, **190** (1), 14–21.

**9-** “Hydrogen on the Fe (112) surface and hydrogen pairs near bcc mixed [111] dislocations: electronic structure”

A. Juan, G. Brizuela, B. Irigoyen, S. Gesari

Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0039–6028. 2000, **466**, 97–110.

**10-** “Oxidation of toluene to benzaldehyde over VSb<sub>0.8</sub>Ti<sub>0.2</sub>O<sub>4</sub>. Effect of the operating conditions”

A. Barbaro, S. Larrondo, B. Irigoyen, N. Amadeo

Catalysis Today. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0920–5861. 2001, **64**, ISS 3–4, 179–187.

**11-** “Electronic structure and bonding of hydrogen in a screw dislocated bcc Fe”

A. Juan, B. Irigoyen, S. Gesari

Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169–4332. 2001, **172**, 8–17.

**12-** “Adsorption reactions of toluene on the (110) vanadium antimonate oxide surface”

B. Irigoyen, A. Juan, S. Larrondo, N. Amadeo

Journal of Catalysis. Academic Press. United Kingdom. ISSN: 0021–9517. 2001, **201**, 169–182.

**13-** “Partial oxidation of toluene to benzaldehyde over vanadium antimonate catalysts doped with titanium. The influence of the Sb content over the deactivation process adsorption”

S. Larrondo, M. Matranga, B. Irigoyen, N. Amadeo.

Studies in Surface Science and Catalysis. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISBN: 978–0–444–53833–8. 2001, **139**, 383–389.

**Capítulo de libro.** Book Series, Vol. 139. Eds: J.J. Spivey, G.W. Roberts, B.J. Davis. 1 volumen, 940 páginas.

**14-** "A combined theoretical and experimental study of V-antimonate catalyst"

B. Irigoyen, S. Larrondo, A. Juan, N. Amadeo

Current Topics in Catalysis: Review Series, Research Trends. India. ISSN: 0972-4508. 2002, 3, 225-243.

**15-** "Toluene adsorption on VSbO<sub>4</sub>. An electronic study"

B. Irigoyen, A. Juan, S. Larrondo, N. Amadeo

Brazilian J. Chemical Engineering. Brasil. ISSN: 0104-6632. 2003, **20**(1), 39-44.

**16-** "The adsorption of toluene on V-Sb oxides. Theoretical aspects"

B. Irigoyen, A. Juan, S. Larrondo, N. Amadeo

Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0039-6028. 2003, **523**, 252-266.

**17-** "Vanadium antimonate as a partial oxidation catalyst"

S. Larrondo, B. Irigoyen, G. Baronetti, N. Amadeo

Applied Catalysis A: General. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0926-860X. 2003, **250/2**, 279-285.

**18-** "Binding Energy of Hydrogen to mixed and screw dislocation"

A. Juan, B. Irigoyen, S. Gesari

Surface Review and Letters. World Scientific Publishing Company. USA. ISSN: 0218-625X. 2005, **12**(2), 227-232.

**19-** "The electronic structure of vanadium antimonate. A theoretical study"

B. Irigoyen, A. Juan, S. Larrondo, N. Amadeo

Catalysis Today. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0920-5861. 2005, **107-108**, 40-45.

**20-** "Preparation and characterization of Ce/Zr mixed oxides and their use as catalysts for the direct oxidation of dry CH<sub>4</sub>"

S. Larrondo, A. Vidal, B. Irigoyen, N. Amadeo, D. Lamas, I. Fábregas, G. Lascalea, N. Reca, A. Craievich

Catalysis Today. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0920-5861. 2005, **107-108**, 53-59.

**21-** "Catalytic behaviour of V-Sb-Ti mixed oxides in the vapour phase reaction of ethyl benzene with air"

S. Larrondo, G. Alvaro, B. Irigoyen, N. Amadeo

Catalysis Today. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0920-5861. 2005, **107-108**, 444-450.

**22-** "Segregation of H, C and B to  $\Sigma=5(013)$   $\alpha$ -Fe grain boundary. A theoretical Study"

S. Gesari, B. Irigoyen, A. Juan

Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169-4332. 2006, **253**, 1939-1945.

**23-** "Theoretical and experimental study of methane steam reforming reactions over nickel catalyst"

C. Pistonesi, A. Juan, B. Irigoyen y N. Amadeo

Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169-4332. 2007, **253**, 4427-4437.

**24-** "Effect of the Fe doped over V-Sb oxide catalyst in toluene selective oxidation"

A. Romero, B. Irigoyen, S. Larrondo, S. Jacobo, N. Amadeo

Catalysis Today. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0920-5861. 2008, **133-135**, 775-779.

**25-** "Theoretical study of the catalytic properties of non stoichiometric vanadium antimonate"

S. Messina, S. Larrondo, A. Juan, B. Irigoyen, N. Amadeo

Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169-4332. 2008, **254**, 5837-5843.

**26-** "The influence of Mg on the C adsorption on Ni(100). A DFT study"

H. Milberg, A. Juan, N. Amadeo, B. Irigoyen.

Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 1381-1169. 2010, **315**, 171-177.

- 27-** "Estudio teórico de las interacciones del azufre sobre las superficies  $\text{CeO}_2(111)$  y  $\text{Rh-CeO}_2(111)$ "  
J. Eugenio Russmann, A. Juan, M.G. González, B. Irigoyen  
Avances en Ciencias e Ingeniería. Chile. ISSN: 0718–8706). ACI 2011, **2(3)**, 101–110.
- 28-** "A First-Principles Modeling of Ni Interactions on  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  Mixed Oxide Solid Solutions"  
F. Cova, D. García Pintos, A. Juan, B. Irigoyen  
Journal of Physical Chemistry C. American Chemical Society, USA. ISSN: 1932–7447. 2011, **115**, 7456–7465.
- 29-** "Adsorption of ammonia on vanadium-antimony mixed oxides"  
H. Seitz, E. Germán, A. Juan, B. Irigoyen  
Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169–4332. 2012, **258**, 3617–3623.
- 30-** "DFT study of  $\text{H}_2$  adsorption on Pd-decorated single walled carbon nanotubes with C-vacancies"  
I. López-Corral, J. de Celis, A. Juan, B. Irigoyen  
International Journal of Hydrogen Energy. Elsevier Science B. V. The United States. ISSN: 0360–3199. 2012, **37** (13), 10156–10164.
- 31-** "Oxygen vacancy formation on the  $\text{Ni/Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2(111)$  surface. A DFT+U study"  
D. García Pintos, A. Juan, B. Irigoyen.  
International Journal of Hydrogen Energy. Elsevier Science B. V. The United States. ISSN: 0360–3199. 2012, **37** (19), 14937–14944.
- 32-** "Mn-doped  $\text{CeO}_2$  solid solution: DFT+U study of an active catalyst for oxidation reactions"  
D. García Pintos, A. Juan, B. Irigoyen  
Journal of Physical Chemistry C. American Chemical Society, USA. ISSN: 1932–7447. 2013, **117**, 18063–18073.
- 33-** "The Effect of Metal Vacancies on Vanadium Antimonate Surface Properties. A Theoretical Study"  
H. Seitz, A. Juan, G. Brizuela, B. Irigoyen  
Journal of Physical Chemistry C. American Chemical Society, USA. ISSN: 1932–7447. 2013, **117** (40), 20548–20556.
- 34-** "Bonding in  $\text{PdH}_2$  and  $\text{Pd}_2\text{H}_2$  systems adsorbed on carbon nanotubes: Implications for hydrogen storage"  
Ignacio López-Corral, Beatriz Irigoyen, Alfredo Juan  
International Journal of Hydrogen Energy. Elsevier Science B. V. The United States. ISSN: 0360–3199. 2014, **39**, (16) 8780–8790.
- 35-** "Density Functional Theory study of water interactions on Mn-modified  $\text{CeO}_2(111)$  surface"  
Delfina García Pintos, Alfredo Juan, Beatriz Irigoyen  
Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169–4332. 2014, **313**, 784–793.
- 36-** "Ce-Pr mixed oxides as active supports for Water-Gas Shift reaction: experimental and density functional theory characterization"  
Eduardo Poggio-Fraccari, Beatriz Irigoyen, Graciela Baronetti, Fernando Mariño  
Applied Catalysis A: General. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0926–860X. 2014, **485**, 123–132.
- 37-** "A first-principles modeling of glycerol and ammonia interactions on the cation-deficient  $\text{VSbO}_4(110)$  surface"  
Ignacio M. Allati, Beatriz L. Irigoyen  
Catalysis Today. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0920–5861. 2015, **254**, 53–61.
- 38-** "Propylene Adsorption on a Non-Stoichiometric  $\text{VSbO}_4(110)$  Surface"  
Hernán Seitz, Romina Luna, Alfredo Juan, Graciela Brizuela, Beatriz Irigoyen

Journal of Physical Chemistry C. American Chemical Society, USA. ISSN: 1932–7447. 2015, **119** (9), 4967–4975.

**39-** "A DFT study of phenol adsorption on a low doping Mn-Ce composite oxide model"

Oriana D'Alessandro, Delfina Garía Pintos, Alfredo Juan, Beatriz Irigoyen, Jorge Sambeth  
Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169–4332. 2015, **359**, 14–20.

**40-** "Experimental and theoretical study about sulfur deactivation of Ni/CeO<sub>2</sub> and Rh/CeO<sub>2</sub> catalysts"

Marco A. Ocsachoque, Juan I. Eugenio Russman, Beatriz Irigoyen, Delia Gazzoli, María G. González  
Materials Chemistry and Physics, Elsevier Science B. V. Australia. ISSN: 0254–0584. 2016, **172**, 69–76.

**41-** "Redox behavior of a low-doped Pr-CeO<sub>2</sub>(111) surface. A DFT+U study"

Brian Milberg, Alfredo Juan, Beatriz Irigoyen  
Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169–4332. 2017, **401**, 206–217.

**42-** "Promoted methane activation on doped ceria via occupation of Pr(4f) states"

Agustín Salcedo, Ignacio Iglesias, Fernando Mariño, Beatriz Irigoyen  
Applied Surface Science. Elsevier Science B. V. The Netherlands. ISSN: 0169–4332. 2018, **458**, 397–404.

**43-** "Unraveling the Origin of Ceria Activity in Water–Gas Shift by First-Principles Microkinetic Modeling"

Agustín Salcedo, Beatriz Irigoyen  
Journal of Physical Chemistry C. American Chemical Society, USA. ISSN: 1932–7447. 2020, **124**, 7823–7834.

**44-** "DFT insights into structural effects of Ni-Cu/CeO<sub>2</sub> catalysts for CO selective reaction towards Water-Gas Shift"

Agustín Salcedo, Beatriz Irigoyen  
Physical Chemistry Chemical Physics. Royal Society of Chemistry, England. ISSN: 1463–9076. 2021, **23**, 3826–3836.

**Publicaciones en revistas nacionales, con referato**

**1-** "Density functional theory (DFT) study of H<sub>2</sub>S interactions on the Pr-doped CeO<sub>2</sub>(111) surface"

Alejandro Kinbaum, Eduardo Poggio-Fraccari, Fernando Mariño, Beatriz Irigoyen  
Journal of the Argentine Chemical Society. ISSN: 1852-1207. 2017, **104**(1), 34–43.

**2-** "Nickel deposition on ceria: A DFT+U study"

Dan Rajsfus, Agustín Salcedo, Brian Milberg, Beatriz Irigoyen  
Journal of the Argentine Chemical Society. ISSN: 1852-1207. 2017, **104**(1), 44–53.

**FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS**

Becario de Post-Doctorado (CONICET): 1

Becarios de Doctorado: 6. (Peruilh: 2, ANPCyT: 3, CONICET: 1)

Tesis Doctorales: 4 (3 finalizadas, 1 en realización)

Investigadores en Formación: 4 (UNS: 1, FIUBA: 2)

Investigadores Formados: 3 (UNS: 1, FIUBA: 2)

Tesis de Grado: 11 finalizadas

## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN APROBADOS Y FINANCIADOS

### DIRECCIÓN DE PROYECTOS

- Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT): 5 (Investigador responsable: 2, Director de línea de investigación: 3).

Proyecto Vigente: PICT–2019–2691 “Producción catalítica de hidrógeno y gas de síntesis a partir de recursos biomásicos”. Res. ANPCyT 015–2021

Co-directora: Responsable de línea de investigación (Grupo Responsable)

- Universidad de Buenos Aires (UBACyT): 5

Proyecto Vigente: UBACyT–20020190100167BA “Producción catalítica de hidrógeno y gas de síntesis a partir de recursos renovables”.

Codirectora

### INVESTIGADOR FORMADO INTEGRANTE DE PROYECTOS

- Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el desarrollo-Red CYTED (2006 – actual)
- Proyectos de Áreas Estratégicas: Programa “Modernización Tecnológica III-IP-PAE 2006”
- Integrante de Proyectos de Investigación de Cooperación Internacional: CNR-ITALY-CONICET; HUT-FINLANDIA-CONICET.
- Desarrollo e Innovación Tecnológica: PROTOPID 2005; PROTOPID 2006; GREENCELL; ENARSA
- Proyectos de Investigación Nacionales: UNS, UBACyT, PID, PICT (desde 1992)

### OTRAS ACTIVIDADES DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA

- Miembro del Consejo Directivo del Instituto de Tecnologías del Hidrógeno y Energías Sostenibles “*ITHES*” (2014 – Continúa).
- Miembro de la Comisión de Doctorado FIUBA. Secretaría de Investigación y Doctorado - Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires (2016 – Continúa)
- Miembro de la Comisión de Maestría en Ciencias de la Ingeniería FIUBA. Secretaría de Posgrado - Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires (2016 – Continúa)
- Miembro de la Sociedad Argentina de Catálisis “*SACa*” (2011 – Continúa)
- Jurado de Tesis de Doctorado: 9 (FCEN-UBA, FI-UBA, UNLP, UNS)
- Integrante de Comisiones de Seguimiento de Tesis Doctorales: 3 (FI-UBA)
- Evaluador de Trabajos de Revistas Científicas Nacionales: LAAR (Argentina),
- Evaluador de Trabajos de Revistas Científicas Nacionales e Internacionales: JACS (American Chemical Society), Catalysis Today (Elsevier), Catalysis Communications (Elsevier), Molecular Catalysis (Elsevier), Journal of Molecular Catalysis (Elsevier), Journal of Physical Chemistry C (American Chemical Society), Applied Surface Science (Elsevier), International Journal of Hydrogen Energy (Elsevier), Computational Materials Science (Elsevier)
- Integrante del Comité Organizador del “Workshop on Catalytic Technologies for Sustainable Industrial Processes”, ICS-UNIDO y DIQ-FIUBA (2011)
- Integrante del Comité Científico de Congresos Nacionales e Internacionales (2005 – Actualidad)
- Miembro de la CTA 5 - UBA (Comisión Técnica Asesora N° 5: Ingeniería, Ciencias del Ambiente y del Hábitat de la Universidad de Buenos Aires (2006 – 2011)
- Evaluador de Convocatorias CONICET: Becas de Doctorado, Ingreso a carrera (CIC), Promociones
- Evaluador de Proyectos de Investigación PIP (CONICET)
- Evaluador de Proyectos de Investigación PICT (ANPCyT)
- Evaluador de Proyectos de otras Universidades (UNSL, UNS)
- Evaluador de Informes de Proyectos de otras Universidades (UNSa, UNL, UNSL, UNS, UNRC)

### **OTRAS ACTIVIDADES EN EL ÁMBITO ACADÉMICO**

- Directora de la Carrera de Ingeniería Química. Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires (2016 – Continúa)
- Coordinadora Académica del proyecto ARFITEC-UNCU2170 ICEH, con la universidad de PAU-Francia.
- Miembro Titular de la Comisión Curricular Permanente de la Carrera de Ingeniería de Alimentos-UBA (2009 – Continúa)
- Integrante de Comisiones de Categorización - Programa de Incentivos a Docentes-Investigadores: (UNICEN-2017; UNS-2018; UNRC-2018).
- Miembro Titular de la Comisión Curricular Permanente de la Carrera de Ingeniería Química-UBA (2010 – 2016)
- Jurado de Tesis de Grado en IA e IQ, FI-UBA (2003 – Actual)
- Jurado de Concursos Docentes en FCEN-UBA y FI-UBA (2004 – Actual)
- Secretaria del Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires (2006 – 2010)
- Miembro de Consejo Asesor del Departamento de Ingeniería Química-UBA (agosto 2005 – julio 2006)
- Miembro Titular de la Comisión de Grado del Departamento de Física-UNS (1996 – 1999)

### **ACTIVIDAD PROFESIONAL EN EL ÁMBITO PRIVADO**

Empresa: DESTILERIA Y.P.F. - Neuquén (1976 – 1978)

Cargo: Jefe de la Sección ANALÍTICA

Actividad: Desarrollo de experiencias de laboratorio para la puesta en marcha de la destilería