

**CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y
TECNOLÓGICO**
Informe Científico¹

PERIODO ²: 2011-2012

Legajo N°:

1. DATOS PERSONALES

APELLIDO: MONTANI

Legajo Nro : 311218

NOMBRES: RUBEN ALFREDO

Dirección Particular: Calle: N°:

Localidad: BAHÍA BLANCA CP: 8000 Tel:

Dirección electrónica (donde desea recibir información): rmontani@criba.edu.ar

2. TEMA DE INVESTIGACION

FISICOQUÍMICA DE SÓLIDOS: Transporte de carga en sistemas vítreos.

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

INGRESO: Categoría: adjunto/sin director Fecha: 7/98

ACTUAL: Categoría: inv. independiente desde fecha: 11/03

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

Universidad y/o Centro: U.Nacional del Sur

Facultad:

Departamento: QUIMICA

Cátedra: FISICOQUÍMICA

Otros: --

Dirección: Calle: AV.ALEM N°: 1253

Localidad: BAHÍA BLANCA CP: 8000 Tel: 0291-4595100

Cargo que ocupa: PROFESOR ASOCIADO (DEDICACION EXCLUSIVA)

5. DIRECTOR DE TRABAJOS. (En el caso que corresponda)

Apellido y Nombres: --

Dirección Particular: Calle: -- N°: --

Localidad: -- CP: -- Tel: --

Dirección electrónica: --

¹ Art. 11; Inc. "e" ; Ley 9688 (Carrera del Investigador Científico y Tecnológico).

² El informe deberá referenciar a años calendarios completos. Ej.: en el año 2008 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2006 al 31-12-2007, para las presentaciones bianuales.

Firma del Director (si corresponde)

Firma del Investigador

6. EXPOSICION SINTETICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO.

Debe exponerse, en no más de una página, la orientación impuesta a los trabajos, técnicas y métodos empleados, principales resultados obtenidos y dificultades encontradas en el plano científico y material. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.

Nuestro principal interés radica en los fenómenos de transporte de carga en vidrios a base de óxidos inorgánicos lo que experimentalmente se concreta fundamentalmente en la medición de la conductividad eléctrica en función de la temperatura, frecuencia y presión en sistemas amorfos iónicos. Nuestra mayor esperanza está puesta justamente en las medidas bajo presión, lo que esperamos nos aportará información de interés relacionada básicamente con los aspectos relacionados al volumen libre de los iones móviles (cationes) y su correlato inmediato con los procesos de relajación asociados. Por otra parte el abordaje computacional del problema se da a partir del uso del formalismo de la Dinámica Molecular.

1--Labor Teórico Computacional:

Realizamos simulaciones de Dinámica Molecular mediante el programa LAMMPS, de un sistema formado por 3456 partículas (1728 de O, 1152 de Li y 576 de Si). Las interacciones entre los iones del sistema son descritas mediante el potencial de Coulomb-Buckingham. Estudiamos este sistema a 700 K, siendo su temperatura de transición vítrea es del orden de 1000 K. Dos importantes resultados logrados en este período deben destacarse:

1.1--Hemos aplicado el denominado "método isoconfiguracional" (IC) introducido por Harrowel (Phys. Rev. Lett., 93, 135701 (2004)), como una alternativa a la descripción tradicional de los denominados "canales" de conducción iónicos que resultaban definidos a partir del análisis de percolación de los sitios de la red visitados asiduamente por los iones móviles (Sunyer, E., P. Jund, & R. Jullien, Phys. Rev. B, 65, 214203 (2002)). Nuestro enfoque alternativo usando el método IC nos permitió identificar (detectar) regiones activas para el movimiento de los iones litio en escalas temporales donde solamente interactúan con sus primeros vecinos (tiempos cortos, 40ps). Esas zonas fueron asociadas a la idea preexistente (experimental) de "canal". De estos resultados ha surgido una publicación en "Solid State Ionics" (ver punto VII de este informe).

1.2--El método IC permite estudiar la propensión al movimiento de una partícula y por lo tanto clasificar a los iones litios en iones de alta y baja propensión. Valiéndonos del coeficiente de Pearson, analizamos en forma detallada la correlación que muestran estas dos clases de iones litio definidos arriba. Los resultados de este trabajo sugieren que el paisaje de energía potencial que experimentan los iones litio con alta tendencia a ser móviles está también influenciado por la interacción entre ellos. Consecuentemente, una descripción completa de la conducción iónica debería contemplarla. De estos resultados ha surgido una publicación en "J.Non-Crys. Solids" (ver punto VII de este informe).

2. Labor experimental.

El montaje del tren de presión (de construcción artesanal en nuestro laboratorio) se pensó originariamente como un proyecto de relativa rápida concreción (1 a 2 años), pero los hechos han mostrado que es un trabajo que requiere aún mas de tiempo de

concreción. En su comienzo hubo dificultades con estanqueidad de las conexiones eléctricas en el cabezal de medida hacia el exterior de la celda. En la actualidad se pudo solucionar ese problema y alcanzar presiones de hasta 3500-4000 atm. con absoluta estanqueidad en las conexiones eléctricas hacia el exterior. Lamentablemente un nuevo problema surgió ahora con el porta-muestras interior en el cual, a medida que se presuriza, los contactos eléctricos internos sobre la muestra se fisuran por efecto mecánico de la presión. Se está trabajando en el diseño de un nuevo porta-muestras para solucionar el inconveniente.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACION REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERIODO.

7.1 PUBLICACIONES. *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellas publicaciones en las que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha mención no debe ser adjuntada porque no será tomada en consideración. A cada publicación, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden que figuran en ella, lugar donde fue publicada, volumen, página y año. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparece en la publicación. La copia en papel de cada publicación se presentará por separado. Para cada publicación, el investigador deberá, además, aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del trabajo y, para aquellas en las que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación.*

1--“Evidence for ion transport channels in lithium silicate glasses using the isoconfigurational ensemble”

R.A.Montani ,C.Balbuena and M.A.Frechero.
Solid State Ionics, 209-212, 5 (2012).

Abstract:

In the context of the ionic transport in glasses, the concept of conduction “channels” (or pathways) has proved to be useful to rationalize both experimental and computational results.

While the concept of transport channel is well defined for crystalline solid conductors, in the case of glasses the concept of transport channel is related to an ephemeral region in which mobile ions have found a convenient environment to perform the electrical transport.

In this paper we present a way to put into evidence the existence of such regions in the diffusion time scale during a molecular dynamics experiment.

To this purpose we use the so-called Isoconfigurational Method (IC) and the associated concept of particle propensity recently introduced by Widmer-Cooper, P. Harrowell, and H. Fynewever (Phys. Rev. Lett. 93, 135701 (2004)). The notion of particle propensity was employed to find the existence of regions which are dynamically more active for the moving particles. We identify these active regions as the most appropriate for a re-arrangement so as to form the conduction “channels” as defined above.

These regions are detected from the very beginning and remain the same all along up to and during the diffusion times. Besides, our study reveals that those active regions are surrounded by a high concentration of non-bridging oxygens and consequently they support the scenario proposed by Greaves (J.Non-Cryst. Solids 71, 203 (1985)).

Participación: Autor principal. Director de Tesis del co-autor Balbuena, C.

2--"Ion dynamics in Lithium Silicate glasses. Computational evidence for the correlation between lithium mobile cations".C.Balbuena, M.A.Frechero and R.A.Montani.

J. Non-Crystalline Solids, 369, 17-22 (2013).

Abstract

Surprisingly, there is not a complete and general working theory for the ionic conduction on structurally disordered inorganic solids at present. In this context, lithium metasilicate glasses appear as paradigmatic and they have been extensively used for investigation in order to identify the main ingredients for a working theory of ionic conducting glasses. In particular among one of these main ingredients, the interaction among the mobile cations appears relevant, especially after recent results showing the existence of preferred pathways for ionic migration. We have performed Molecular Dynamics simulations on lithium metasilicate to better understand the ion-ion interactions. We introduce a very useful tool developed by Harrowell and co-workers to study propensity to movement and the use of the Pearson's coefficient to characterize the correlation among the different kinds of ion. Our study allows us to support –from an alternative point of view- the idea of a landscape of energy for lithium ions with high propensity to movement (which eventually can belong to a high propensity cluster as defined in our previous work) strongly dependent on the interaction among them. On the contrary, in the same window of time, these lithium ions do not strongly correlate with their nearest oxygen ions.

Participación.: Co-autor. Director de Tesis del co-autor Balbuena, C.

7.2 TRABAJOS EN PRENSA Y/O ACEPTADOS PARA SU PUBLICACIÓN. *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellos trabajos en los que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Todo trabajo donde no figure dicha mención no debe ser adjuntado porque no será tomado en consideración. A cada trabajo, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden en que figurarán en la publicación y el lugar donde será publicado. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparecerá en la publicación. La versión completa de cada trabajo se presentará en papel, por separado, juntamente con la constancia de aceptación. En cada trabajo, el investigador deberá aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del mismo y, para aquellos en los que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación.*

7.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION. *Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo, indicando el lugar al que han sido enviados. Adjuntar copia de los manuscritos.*

1--"Evidence of active regions for ion transport in lithium silicate glasses using the isoconfigurational ensemble method. Part II."

C.Balbuena, M.A.Frechero and R.A.Montani.

Enviado a "Solid State Ionics".

Abstract:

In the context of the ionic transport in glasses, the concept of conduction “channels” (or pathways) has proved to be useful to rationalize both experimental and computational results. While the concept of transport channel is well defined for crystalline solid conductors, for the case of glasses this concept mainly refers to a finite region of the sample (at least in the diffusive time scale) in which mobile ions have a convenient environment to perform the electrical transport.

In the previous work, we present an alternative way to put into evidence the existence of such regions in the diffusion time scale during a molecular dynamics experiment. In fact in that work we use the so-called Isoconfigurational Method (IC) and the associated concept of particle propensity, both recently introduced by Harrowell and co-workers. Then the notion of particle propensity to movement --immerse in the IC method-- was employed to find the existence of regions which are dynamically more active for the moving particles: the conduction “channels”.

In the present paper we provide more computational evidence to support our alternative description of a “channel”: we show in this paper that our procedure is exactly equivalent to the approach previously adopted by other authors in the literature. This coincidence between the two searching strategies allow us to add more information about the nature of the channels. In fact, we can state now for the first time that the existence of the channels is defined at the very beginning of the dynamics and they remain almost unchanged even in the diffusive (nanosecond) scale. Besides, it was shown that a “channel” is a region of sample which is also highly correlated dynamically during the trajectory of the moving ions, well in contrast with the usual picture which only shows the existence of a spatial (static) correlation.

Participación.: Co-autor. Director de Tesis del co-autor Balbuena, C.

7.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION.

Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo.

1--"Broken ergodicity captured with molecular dynamics simulation in an oxide glass."

C. Balbuena, R. Montani and M.A. Frechero,

Abstract.

From the results of molecular dynamic simulations of lithium silicate glasses - at temperatures above and below their transition temperature (T_g), we propose a simple way to search for broken ergodicity in this paradigmatic oxide glass, considering that having the knowledge of this behavior is critical in the use of statistical mechanics as a tool for data analysis in order to calculate dynamical and structural properties. In this work, we understand the glass transition temperature as the point that reflects an abrupt qualitative transformation in the way the system explores its possible states. We have revised the broken ergodicity phenomena through its relationship with the observation time and the dynamic diversity of their atoms.

Participación.: Co-autor. Director de Tesis del co-autor Balbuena, C.

7.5 COMUNICACIONES. *Incluir únicamente un listado y acompañar copia en papel de cada una. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores).*

7.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS. *Incluir un listado y acompañar copia en papel de cada uno o referencia de la labor y del lugar de consulta cuando corresponda.*

8. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

8.1 DESARROLLOS TECNOLÓGICOS. *Describir la naturaleza de la innovación o mejora alcanzada, si se trata de una innovación a nivel regional, nacional o internacional, con qué financiamiento se ha realizado, su utilización potencial o actual por parte de empresas u otras entidades, incidencia en el mercado y niveles de facturación del respectivo producto o servicio y toda otra información conducente a demostrar la relevancia de la tecnología desarrollada.*

XX

8.2 PATENTES O EQUIVALENTES. *Indicar los datos del registro, si han sido vendidos o licenciados los derechos y todo otro dato que permita evaluar su relevancia.*

XX

8.3 PROYECTOS POTENCIALMENTE TRANSFERIBLES, NO CONCLUIDOS Y QUE ESTAN EN DESARROLLO. *Describir objetivos perseguidos, breve reseña de la labor realizada y grado de avance. Detallar instituciones, empresas y/o organismos solicitantes.*

XX

8.4 OTRAS ACTIVIDADES TECNOLÓGICAS CUYOS RESULTADOS NO SEAN PUBLICABLES *(desarrollo de equipamientos, montajes de laboratorios, etc.).*

XX

8.5 Sugiera nombres (e informe las direcciones) de las personas de la actividad privada y/o pública que conocen su trabajo y que pueden opinar sobre la relevancia y el impacto económico y/o social de la/s tecnología/s desarrollada/s.

XX

9. SERVICIOS TECNOLÓGICOS. *Indicar qué tipo de servicios ha realizado, el grado de complejidad de los mismos, qué porcentaje aproximado de su tiempo le demandan y los montos de facturación.*

XX

10. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

10.1 DOCENCIA

XX

10.2 DIVULGACIÓN

XX

11. DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES. *Indicar nombres de los dirigidos, Instituciones de dependencia, temas de investigación y períodos.*

--Licenciado en Química Cristian Balbuena,
Becario CONICET,
"Caracterización de la dinámica de iones en vidrios paradigmáticos"
Inicia 2010 al presente.

12. DIRECCION DE TESIS. *Indicar nombres de los dirigidos y temas desarrollados y aclarar si las tesis son de maestría o de doctorado y si están en ejecución o han sido defendidas; en este último caso citar fecha.*

--Director de la TESIS DOCTORAL de la Licenciada Evangelina Cardillo, titulada "Fenómenos de transporte de carga en sistemas vítreos formados a partir de óxidos inorgánicos." (Finalizada, defendida en 2012).

--Director de la TESIS DOCTORAL del Licenciado Cristian Balbuena, titulada "Caracterización de la dinámica de iones en vidrios paradigmáticos" (Trabajo en curso desde 2010).

--Director de la TESINA de graduación de la Licenciatura en Química (350 horas) de la Srta. Romina Forte Nerán titulada "Propiedades fisicoquímicas de los vidrios de fosfato. Estudio de la estructura de la matriz vítrea y la conductividad" (trabajo finalizado diciembre 2011).

--Director de la TESINA de graduación de la Licenciatura en Química (350 horas) del Sr. Pablo Di Prátula titulada "Comparación de la conductividad de los sistemas vítreos a base de V2O5- TeO2 modificados con Cu2O y Ag2O" (trabajo finalizado diciembre 2012).

13. PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS. *Indicar la denominación, lugar y fecha de realización, tipo de participación que le cupo, títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas y autores de los mismos.*

-TREFEMAC, 2011, San Luis.

"Canales de transporte iónico en vidrios de silicatos"

C. Balbuena, M.A.Frechero y R.A.Montani

- Reunion Nacional de Fisica AFA, 2011, Uruguay.

"La transición vítrea de un sistema cuyos iones móviles difunden en un sólido amorfo: Li₂SiO₃.

M.A.Frechero ,C. Balbuena y R.A.Montani

- TREFEMAC, 2012, La Cumbre, Córdoba.

"Búsqueda de zonas mmóviles en metasilicato de litio. Relación dinámico-estructural a tiempos cortos y largos"

C. Balbuena, M.A.Frechero y R.A.Montani

- TREFEMAC, 2012, La Cumbre, Córdoba.

"Evidencia computacional de la correlación entre los iones móviles en un silicato inorgánico paradigmático por debajo de su Tg."

C. Balbuena, M.A.Frechero y R.A.Montani

- Reunión Nacional de Fisica AFA, 2012, Villa Carlos Paz, Córdoba.

"La estructura local condiciona la difusión un vidrio iónico paradigmático? La relación entre dinámica de tiempos cortos y largos para los portadores de carga"

C. Balbuena, M.A.Frechero y R.A.Montani.

- Reunion Nacional de Fisica AFA, 2012, Villa Carlos Paz, Córdoba.

Estudio sobre el origen de los canales de conduccion iónica en un vidrio.

C. Balbuena, M.A.Frechero y R.A.Montani

14. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC. *Señalar características del curso o motivo del viaje, período, instituciones visitadas, etc.*

xx

15. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO. *Indicar institución otorgante, fines de los mismos y montos recibidos.*

Universidad Nacional del Sur. Proyecto Grupo de Investigación (PGI). ca \$ 3.000 totales en el período del presente informe.

16. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO. *Describir la naturaleza de los contratos con empresas y/o organismos públicos.*

xx

17. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.

xx

18. ACTUACION EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCION O EJECUCION CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA. *Indicar las principales gestiones realizadas durante el período y porcentaje aproximado de su tiempo que ha utilizado.*

xx

19. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO. *Indicar el porcentaje aproximado de su tiempo que le han demandado.*

Primer cuatrimestre años 2011 y 2012 respectivamente.

Dictado de la materia curricular "Físicoquímica D. Termodinámica estadística" (nivel del curso: "Statistical Mechanics", D.McQuarrie). 60 horas de clase frente a alumnos.

Segundo cuatrimestre años 2011 y 2012 respectivamente.

Dictado de la materia curricular "Físicoquímica C. Química Cuántica". (Nivel del curso "Quantum Chemistry". I.Levine). 60 horas de clase frente a alumnos.

Segundo cuatrimestre de 2012.

Dictado del Seminario para alumnos de posgrado: "Introducción a la fisicoquímica de los vidrios". 40 horas frente a alumnos.

20. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES. *Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período.*

--Miembro del tribunal que entendió en la tesis para optar al grado de Doctor en Ciencia de Materiales del Ing. David C. Malaspina.

"Relación entre aspectos estructurales y dinámicos en sistemas complejos: sistemas vítreos, agua sobreenfriada y agua de hidratación y/o biológica."

UNS, 29 de abril de 2011.

--Miembro suplente del Consejo departamental del Departamento de Química de la UNS.

--Coordinador del Area de Físicoquímica del Departamento de Química, UNS

21. TITULO Y PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO. *Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

A. EXPERIMENTAL .

a.1. Breve reseña y objetivos generales.

En los vidrios formados a partir de M_2O , V_2O_5 y TeO_2 , este último es el denominado "óxido formador" i.e. el óxido capaz de formar una matriz vítrea; el óxido de metal de transición (V_2O_5) es el responsable de la conducción electrónica y el óxido metálico M_2O ($M=Li, Na, Ag$) es el responsable de la conductividad iónica debido a la movilidad del catión metálico, estos vidrios se comportan como conductores mixtos: i.e. electrónicos e iónicos.

Cuando en un vidrio de fórmula: $XM_2O.(1-X)V_2O_5.2TeO_2$, se reemplaza la fracción molar X , del óxido de metal de transición por el óxido metálico, se pasa de un régimen de conducción fundamentalmente electrónico a un régimen de conducción iónico. Una isoterma de conductividad vs. X , presentará un punto crítico en el cual el valor la conductividad total del sistema arriba a un mínimo varios órdenes de magnitud inferior al que corresponde ya sea a $X=0$ ó $X=1$. Este fenómeno ha sido observado en varios sistemas vítreos de las mismas características. La existencia de ese mínimo en la isoterma de conductividad fue explicada a partir de efectos de concentración de especies en numerosos trabajos de nuestro laboratorio [1-7].

El comprender las leyes subyacentes que gobiernan el transporte iónico y electrónico en estos vidrios es un problema abierto, no solo desde el punto de vista básico ó fundamental, sino desde un punto de vista industrial ó aplicado. Así resulta necesaria la introducción de la variable presión en las determinaciones de la conductividad eléctrica. Para los vidrios conductores iónicos (i.e. $0.6 < X < 1$), estos estudios bajo presión permiten obtener información acerca de los efectos de volumen libre en el transporte iónico. En particular, permite la modificación del volumen del entorno del sitio activo para el transporte. Este efecto del volumen es el que permite determinar en cual de los escenarios se produce la relajación dieléctrica: si en un escenario del tipo paralelo con una distribución de tiempos de relajación o en un escenario con procesos de relajación individuales en serie fuertemente acoplados. Ambos escenarios tiene un correlato inmediato en el respectivo espectro de conductividad versus frecuencia.

En lo que hace a los vidrios preponderantemente electrónicos ($0 < X < 0.4$), el efecto de la presión permitirá discernir si el modelo de pequeño polarón es suficiente para explicar la dependencia entre conductividad y temperatura, o bien los efectos de solapamiento entre las nubes electrónicas de los iones $V(IV)-V(V)$ generado por el efecto de la presión motiva la inclusión de otro modelo del transporte electrónico.

a.2. Labor a realizar en el próximo período.

Concretamente nuestra labor experimental consistirá en continuar con los lineamientos ya establecido previamente y que se resumen arriba (a.1). Según ya se mencionó esta línea de trabajo está bastante demorada por problemas surgidos fundamentalmente por el tren de presión. (ver el punto VI de este informe). Consecuentemente el trabajo fundamental que urge aquí es continuar en la labor tendiente a poner en marcha el tren de presión de modo tal de finalmente poder efectuar las determinaciones eléctricas previstas a distintas presiones (hasta 4000 atm). Este trabajo consiste fundamentalmente en el rediseño de la celda porta muestra la que al presente genera los problemas que impiden el avance de este trabajo.

1. R.A. Montani, A. Lorente, M. Vincenzo, Solid State Ionics 130, 91–95 (2000).
2. R. Montani, A. Lorente, M. Frechero, Solid State Ionics 146, 323–327 (2002).
3. R.A. Montani, S.E. Giusia, Phys. Chem. Glasses 42, 12–16 (2001).

4. R.A. Montani, M.A. Frechero, Solid State Ionics 158, 327–332 (2003).
5. R.A. Montani, M.A. Frechero, Solid State Ionics 177, 2911–2915 (2006).
6. M.A. Frechero, O.V. Quinzani, R.S. Pettigrosso, M. Villar, R.A. Montani, J. Non-Cryst. Solids 353, 2919–2927 (2007).
7. E.C. Cardillo, R.A. Montani and M.A. Frechero, J. Non-Crystalline Solids, 356, 2760-2763 (2010).

B. TEORICO COMPUTACIONAL

b.1. Breve reseña y objetivos generales.

Nuestro objetivo general consiste en tratar de determinar los eventos elementales constituyentes del/los mecanismo/s de relajación en sistemas vítreos conductores iónicos.

Existen dos razones principales para conocer en mayor detalle el comportamiento del estado vítreo: por un lado, los vidrios constituyen materiales de amplia diversidad desde el punto de vista tecnológico, con un número de aplicaciones que crece día a día (fibras ópticas, polímeros y células fotovoltaicas). Por otro lado, son sistemas sumamente interesantes para las ciencias básicas dado que su complejidad ha dificultado tanto el lograr una descripción realista en función de la mecánica estadística tradicional, como el acceder experimentalmente a información microscópica relevante [1-4].

Adicionalmente, los sistemas vítreos se inscriben dentro de los sistemas complejos, que constituyen un extenso contexto interdisciplinario. Estos abarcan a sistemas muy diversos desde el punto de vista de lo estructural tales como vidrios y biopolímeros pero en los que emergen comportamientos dinámicos comunes. Es por ello que la generalidad de algunas preguntas puede exceder largamente el contexto específico de los vidrios estructurales, tal como hemos evidenciado a partir de la ocurrencia de regímenes de relajación y límites dinámicos de gran universalidad, principalmente la dinámica lenta gobernada por procesos activados presente desde la relajación de spin glasses hasta el "protein folding" [5]

En particular, nuestro objetivo consiste en tratar de individualizar y caracterizar los ingredientes fundamentales para la formulación de una teoría dinámica que intente abarcar en forma sistemática y general el fenómeno de transporte de carga iónica en sistemas vítreos. Consecuentes con nuestro objetivo --y ya en particular-- nos concentraremos en caracterizar y determinar el rol de las heterogeneidades dinámicas --es decir ciertas regiones de la muestra resultan móviles a distintos tiempos--, determinando un escenario inhomogéneo de relajación [6] pero en el cual la inhomogeneidad es no sólo espacial sino temporal. Este tipo de heterogeneidades dinámicas han sido detectadas experimentalmente en sistemas vítreos como orto-terfenil y poliestireno pero sin la posibilidad de caracterizar microscópicamente dichas heterogeneidades y también han sido verificadas para el caso de sílice amorfa [7]

En particular, en lo tocante a los experimentos numéricos, nos concentraremos sobre un sistema real paradigmático como lo es el metasilicato de litio. Para nuestros estudios utilizaremos la batería de métodos de la mecánica estadística, principalmente simulaciones computacionales de dinámica molecular [8].

b.2. Labor a realizar en el próximo período.

Específicamente en el próximo período se continuará con lo desarrollando hasta el momento y explicado en el punto VI de este informe.

Fundamentalmente nuestros estudios recientes nos han permitido validar en este campo una valiosa herramienta estadística: el Método isoconfiguracional [9].

Consecuentemente, una vez validada esta metodología nuestro interés al presente es extender los resultados obtenidos en los sistemas en donde el hay un solo tipo de cation móvil a sistemas en donde los cationes móviles son dos.

Esta búsqueda aparece como importante en dirección a tratar de aislar los elementos constituyentes de la dinámica puesta en juego en el denominado "efecto alcalino mixto" (MAE), esto es: cuando en un vidrio en el cual hay un solo catión móvil y parte de este es reemplazado por un catión móvil diferente se produce una disminución del coeficiente de difusión de ambos cationes móviles de varios órdenes de magnitud respecto a los respectivos valores cuando se encuentran solos. En una isoterma de coeficiente de difusión en función de la fracción de catión reemplazado (que irá entre 0 y 1) los coeficientes de difusión presentan una disminución monótona y en algún valor de composición ocurre el cruce de ambas isotermas [10].

En segundo término, los elementos constituyentes de la dinámica de relajación que se llevan identificados, como así también los que provendrán de trabajos en ejecución al presente (y futuro inmediato), serán testeados mediante una simulación de Montecarlo que permitirá la construcción de un escenario para la relajación iónica, ya sin el ruido accesorio producido por otros fenómenos no conducentes a la difusión. [11,12].

1. S. Sastry, P.G. Debenedetti and F.H. Stillinger, Nature 393, 554 (1998).
2. C.A. Angell, Science, 267, 1924 (1995).
3. P.G. Debenedetti and F.H. Stillinger, Nature 410, 259 (2001).
4. P.W. Anderson, Science, 267, 1615 (1995).
5. G. Appignanesi, R. Montani and A. Fernández, J. Stat. Phys. 91, 669 (1998).
6. P.G. Debenedetti, "Metastable Liquids: Concepts and Principles", Princeton University Press. 1998.
7. M. Vogel and S.C. Glotzer, Phys. Rev. Lett. 92, 255901 (2004).
8. M.P. Allen and D.J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press Inc. N.Y., 1987.
9. A. Widmer-Cooper, P. Harrowell, and H. Fynewever, Phys. Rev. Lett. 93, 135701 (2004).
10. M.D. Ingram, Physics and Chemistry of Glasses, 28, 215 (1987)
11. R.A. Montani, C. Balbuena and M.A. Frechero. Solid State Ionics, 209-212, 5 (2012).
12. C. Balbuena, M.A. Frechero and R.A. Montani, J. Non-Crystalline Solids, 369, 17-22 (2013).

Condiciones de la presentación:

- A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Investigador, la que deberá incluir:
 - a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 21).
 - b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, en otra carpeta o caja, en cuyo rótulo se consignará el apellido y nombres del investigador y la leyenda "Informe Científico Período".
 - c. Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico:
 - a. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: infinvest@cic.gba.gov.ar (puntos 1 al 21), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.

-
- b. En el mismo correo electrónico referido en el punto a), se deberá incluir como un segundo documento un currículum resumido (no más de dos páginas A4), consignando apellido y nombres, disciplina de investigación, trabajos publicados en el período informado (con las direcciones de Internet de las respectivas revistas) y un resumen del proyecto de investigación en no más de 250 palabras, incluyendo palabras clave.

Nota: El Investigador que desee ser considerado a los fines de una promoción, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.