

CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

Informe Científico¹

PERIODO ²: 2015-2016

1. DATOS PERSONALES

APELLIDO: MONTANI

NOMBRES: Rubén Alfredo

Dirección Particular: Bahía Blanca CP: 8000 Tel:

291-156461535

Dirección electrónica (donde desea recibir información, que no sea "Hotmail"):

rmontani@criba.edu.ar

2. TEMA DE INVESTIGACION

Fisicoquímica de Sólidos: transporte iónico en sistemas vítreos y cristalinos

PALABRAS CLAVE (HASTA 3) Conductividad eléctrica Dinámica Molecular
Conductores iónicos

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

INGRESO: Categoría: adj. S/director Fecha: 07/1998

ACTUAL: Categoría: Independiente desde fecha: 11/2003

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

Universidad y/o Centro: Universidad Nacional del Sur

Facultad: Química

Departamento: Química

Cátedra: Fisicoquímica

Otros:

Dirección: Calle: Av. Alem N°: 1253

Localidad: Bahía Blanca CP: 8000 Tel: 291-4595100

Cargo que ocupa: Profesor Asociado c/ Dedicación 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 2017 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2015 al 31-12-2016, para las presentaciones bianuales. Para las presentaciones anuales será el año calendario anterior.

Firma del Director (si corresponde)

Firma del Investigador

6. RESUMEN DE LA LABOR QUE DESARROLLA

Descripción para el repositorio institucional. Máximo 150 palabras.

Termodinámica estadística, empleo del formalismo de la Dinámica Molecular orientada al estudio de los fenómenos de transporte de carga en sólidos ya sean cristalinos o vidrios a base de óxidos. Se hace énfasis en la relación del comportamiento dinámico de los portadores de carga con la estructura del material. Se emplean otras técnicas de investigación computacional como el Formalismo de Monte Carlo y del Ensamble Isoconfiguracional.

7. 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 se centra en los fenómenos de transporte de carga en sistemas iónicos cristalinos y vítreos con un abordaje teórico-computacional a partir del uso del formalismo de la Dinámica Molecular.

Realizamos simulaciones de Dinámica Molecular mediante el paquete LAMMPS, de un sistema vítreo paradigmático como lo es el metasilicato de litio, donde las interacciones entre los iones del sistema son descritas mediante el potencial de Coulomb-Buckingham.

Hemos continuado en esta labor empezada hace ya 4 años, donde hemos además usado el denominado “método isoconfiguracional” (IC) para lograr una descripción alternativa a los denominados “canales” de conducción iónicos. Efectivamente, este enfoque alternativo usando el método IC nos permitió identificar detectar regiones activas de alta conectividad dinámica para el movimiento de los iones litio en escalas temporales donde solamente interactúan con sus primeros vecinos (“cage”). Mas recientemente -y ya dentro del período de labor que aquí se informa- hemos realizado trabajos que completan los hallazgos en esa dirección inicial, estudiando el problema de la ruptura de la ergodicidad de este sistema vítreo en términos de la ventana de tiempo de observación y la diversidad del comportamiento dinámico de los átomos que forman el sistema.

Por otra parte, hemos estudiado también el comportamiento dinámico de los iones Li en la ventana de tiempo [0.1ps, 10ps] donde se define el fenómeno macroscópico conocido como Nearly Constant Loss (NCL), poniendo en evidencia dos comportamientos posibles. Por un lado el de los Li⁺ que evolucionan en los sitios de alta propensión al movimiento (sitios HP), realizando incipientes movimientos extra-cage y por otra parte el de los Li⁺ que evolucionan únicamente dentro de su caja (intra-cage) realizando movimientos de oscilación alrededor de su punto de equilibrio. Consecuentemente mostramos que la contribución efectiva al Recorrido Cuadrático Medio (MSD) en esta ventana de tiempo la realizan fundamentalmente los iones que evolucionan en los sitios HP, generando el resto de los iones Li un comportamiento del MSD consistente con el fenómeno de NCL.

Con los resultados obtenidos fue publicado un trabajo a inicios de 2015 y hay otro recién escrito esperando su envío. Se presentaron además tres comunicaciones a congresos de la especialidad.

Finalmente se defendió una tesis doctoral (clasificada como “sobresaliente” por el Tribunal integrado por los Dres. Tomás Grigera, Sergio Cannas y Daniel Vega) en la cual actué como Director.

Cabe destacar que al presente se está a la expectativa de alumnos interesados en realizar un trabajo de posgrado (Tesis o Maestría). Debo anotar que buscar en un Departamento de Química interesados en la órbita de nuestra incumbencia constituye sin duda una espera a largo aliento.

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

8.1 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. Asimismo, para cada publicación deberá indicar si se encuentra depositada en el repositorio institucional CIC-Digital.*

8-1

Is Ergodicity in an oxide glass ionic conductor a matter of time?

C.Balbuena, R.Montani and M.A.Frechero,
Physica A 432 (2015) 400–409

ABSTRACT:

From the results of molecular dynamic simulations of lithium metasilicate glass -at temperatures above and below their transition temperature (T_g)- we propose a simple graphical representation to search for the broken ergodicity in an ionic oxide glass. Knowing when ergodicity is lost is critical for the proper use of statistical mechanics as a tool for measuring dynamical and structural properties through molecular dynamic simulation. This work shows how an abrupt qualitative transformation occurs in the way the system explores its possible states when it goes down below the glass transition temperature range. We revise 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.

8.2 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.*

8.3 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.

8.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION.

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

Topological environments associated to the short time behaviour of mobile cations in metasilicate glasses: from caged to subdiffusional dynamics

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

We report some new Molecular Dynamics studies performed on the paradigmatic lithium metasilicate glass. The studied time window corresponds to the dynamic caged regime for the mobile lithium ions, where the experimental physical phenomenon known as the Nearly Constant Loss appears and the motion of lithium ions becomes dynamically heterogeneous. From our dynamical-structural studies we show that there are two extreme kinds of topological environments acting as hosting sites for the lithium ions and we also demonstrate that these two sites also implies the existence of two extreme different dynamic behaviours for the occupying ion.

We put into evidence for the first time that only Li cations in sites presenting high propensity to movement will evolve in a continuous manner in that time window contributing effectively to the mean square displacement mainly due to the high spatial and dynamical interconnectivity among this kind of sites. On the contrary, when a Li cation is hosted in a low propensity site it remains confined for a considerable portion of time waiting for the possibility of a hopping event to an available site. We show that only certain topological zones allowing the appropriate microscopic ion dynamics contributes to the macroscopically detected NCL behaviour

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

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

8.6 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. Indicar en cada caso si se encuentra depositado en el repositorio institucional CIC-Digital.*

9. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

9.1 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.*

9.2 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.*

9.3 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.

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

9.5 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.

10. 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.

11. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

11.1 DOCENCIA

11.2 DIVULGACIÓN

En cada caso indicar si se encuentran depositados en el repositorio institucional CIC-Digital.

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

13. 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.

Tesis Doctoral

Licenciado Cristian Balbuena

Título "Fenómenos de relajación y movilidad iónica en un vidrio paradigmático: el metasilicato de litio".

Fecha de defensa: 13 de marzo de 2015.

Clasificación: SOBRESALIENTE 10.

14. 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.

XIII TREFEMAC: Congreso Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia Condensada

Los Reyunos, Mendoza del 6 al 8 de mayo de 2015.

Tipo de exposición: Póster.

Título: Estudios in silico de la dinámica de portadores de carga en el metasilicato de litio en la ventana de los tiempos predifusionales.

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

--AFA 100 Reunión de la Asociación Física Argentina.

San Luis, Argentina, del 22 al 25 de septiembre de 2015.

Tipo de exposición: Póster.

Título: Comportamiento dinámico a tiempos cortos de los cationes móviles en el metasilicato de litio: desde a la dinámica de "caging" a la subdifusional.

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

--AFA 101 Reunión de la Asociación Física Argentina.

San Miguel de Tucumán, Argentina, del 4 al 7 de octubre de 2016

Tipo de exposición: Póster.FA 2016 4 al 7 de octubre de 2016

Título: Dinámica de caja y subdifusional de los iones móviles en el metasilicato de litio.

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

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

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

--CIC, "Programa de Subsidios Proyectos de Investigación Científica y Tecnológica – Convocatoria 2013"

Segunda cuota de \$ 25.000, recibida en 2016.

--Universidad Nacional del Sur. PGI (Proyecto Grupos de Investigación) aprox \$5000/año.

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

18. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.

19. 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.*

Año 2016

Miembro de la Comisión Asesora de Química de la CIC.

Evaluaciones varias totalizando unas 40 horas al año.

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

AÑO 2015:

-Dictado total de la materia "Fisicoquímica C" (Química Cuántica). (60 horas)

-Dictado total de la materia "Fisicoquímica D" (Termodinámica estadística). (60 hs)

-Dictado parcial de la materia "Introducción a la Ciencia de Materiales" (20 hs)

-Dictado parcial de la Materia "Química de sólidos" (20 hs)

Nota: las tres primeras son materias curriculares de la carrera "Licenciatura en Química" y la cuarta es una materia de posgrado.

Tiempo demandado: 20%, incluyendo clases, consulta, preparación de clases y corrección de exámenes, durante el período lectivo.

AÑO 2016

- Dictado total de la materia "Fisicoquímica C" (Química Cuántica). (60 hs)
- Dictado total de la materia "Fisicoquímica D" (Termodinámica estadística). (60 hs)
- Dictado parcial de la materia "Introducción a la Ciencia de Materiales" (20 hs)
- Dictado parcial de la Materia "Química de sólidos" (20 hs)

Nota: las tres primeras son materias curriculares de la carrera "Licenciatura en Química" y la cuarta es una materia de posgrado

Tiempo demandado: 20%, incluyendo clases, consulta, preparación de clases y corrección de exámenes, durante el período lectivo.

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

22. TÍTULO, PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PRÓXIMO PERÍODO. *Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicitar la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

1. Conducción iónica en un vidrio paradigmático: metasilicato de litio.

Nuestro objetivo general consiste en tratar de determinar los eventos elementales a escala atómica constituyentes del mecanismo de relajación/conducción eléctrica 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.

Nuestros estudios recientes nos han permitido ya validar en este campo una valiosa herramienta estadística: el método isoconfiguracional. Consecuentemente, una vez validada esta metodología nuestro interés al presente es extender los resultados obtenidos en los sistemas en donde hay un solo tipo de catión móvil a sistemas en donde los cationes móviles son dos. En esta dirección ya hemos abordado con éxito el aislar los elementos constituyentes de la dinámica puesta en juego en el denominado "efecto alcalino mixto" (MAE). También estamos interesados en la dinámica de los tiempos muy cortos, esto es en la ventana temporal correspondiente a los tiempos de "cagging" y subdifusionales. Justamente en esa ventana temporal está definido lo que se conoce actualmente como la "Segunda Universalidad" también conocida como "Nearly Constant Loss".

Consecuentemente en este subtema continuaremos en la misma dirección, concentrados esta vez en extender los resultados logrados (y ya informados) al estudio de su variación con la temperatura, lo que aportará nuevos aspectos de los fenómenos y sin

duda dará generalidad a esos resultados que hasta el presente fueron obtenidos a solo dos temperaturas (973 K y 1173 K).

2. Sistemas superconductores iónicos cristalinos.

Este es un subtema que iniciaremos en este nuevo período.

Los conductores superiónicos cristalinos son un grupo importante de materiales que tienen aplicaciones tecnológicas a gran escala en áreas tales como almacenamiento y generación de energía (baterías y pilas de combustible), sensores y dispositivos electrocrómicos.

Resultan además esenciales para el desarrollo de todos los dispositivos electroquímicos de estado sólido, los que a su vez que tienen muchas ventajas sobre aquellos basados en electrolitos líquidos incluyendo facilidad de miniaturización y estabilidad a altas temperaturas. Por ejemplo, los sensores de gas oxígeno basados en conductores de óxido están siendo ampliamente utilizados para monitorear gases de escape de automóviles. También se están estudiando conductores de óxido para la construcción de células de combustible de óxido sólido (SOFC). Nafion y los polímeros sulfonados relacionados están siendo investigados como conductores de protones en células de combustible de membrana de electrolito polimérico (PEM).

Entre los conductores catiónicos superiónicos, el sistema paradigmático es el yoduro de plata, en el que la alta conductividad iónica, se obtiene luego de la transición de fase a 147 C. Efectivamente, por encima de esa temperatura –la fase alfa- la estructura cristalina posee una subred aniónica bcc donde los dos cationes de plata en la celda unitaria pueden ocupar posiciones de tres tipos: 12d-tetraédricas, 24h-trigonal y 6b-octaédricas. Al enfriarse, la fase superconductora α -AgI se transforma en β -AgI con una estructura hexagonal tipo blenda de zinc.

En la búsqueda de nuevos conductores de plata, las mezclas con diferentes compuestos destinados a modificar la matriz han probado ser eficiente para lograr conductores con propiedades tecnológicas relevantes basadas en bajar su punto de transición a la fase superionica, como así también encontrar mezclas que permitan disminuir costos en la producción de esos compuestos. Al igual que el primer subtema reseñado arriba, estamos interesados en los ingredientes unitarios constituyentes la dinámica de los iones portadores de carga (aquí el catión Ag) y en este caso en su interacción con la estructura cristalina en este caso a diferencia del caso anterior donde estamos en presencia de estructuras vítreas.

En esa dirección nuestro principal objetivo es el estudio de compuestos superiónicos conductores de ión Ag a base de AgI-KI-NH4I.

Ya en nuestro laboratorio de Fisicoquímica de Sólidos se ha previamente trabajado sobre el AgI desde un punto de vista experimental y teórico. Consecuentemente, en este próximo período bianual nos avocaremos al IK y luego al NH4I para pasar finalmente a las mezclas binarias y terciarias de esos compuestos.

Al igual que en el Título 1, usaremos el formalismo de la Dinámica Molecular, fundamentalmente partir el paquete de simulación LAMMPS, que nos ha permitido los logros recientemente señalados en informes previos. Consecuentemente, la determinación del Recorrido Cuadrático Medio, la Función de distribución radial, la Función de van Hove, la Función de Scattering y otras funciones de correlación temporales, conforman la batería principal de datos resultantes del experimento computacional, utilizándose para su posterior análisis otras herramientas de la Termodinámica Estadística como por ejemplo el Método Isoconfiguracional entre otros.--

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:
- Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 22).
 - 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".
 - Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico:
- Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: infinvest@cic.gba.gob.ar (puntos 1 al 22), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
 - 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.
- C. Sistema SIBIPA:
- Se deberá peticionar el informe en la modalidad on line, desde el sitio web de la CIC, sistema SIBIPA (ver instructivo).

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.