



Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado  
Secretaría de Ciencia, Tecnología y Posgrado

SISTEMA DE INFORMACION DE CIENCIA Y  
TECNOLOGIA (SICyT)

FORMULARIO PARA PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Código del Proyecto: MAECADN0008348TC

#### 1. Unidad Científico-Tecnológica

FR Neuquén - Facultad Regional del Neuquen

#### 2. Denominación del PID

DINÁMICA MOLECULAR EN NANOMATERIALES

#### 3. Resumen Técnico del PID

La nanotecnología es la manipulación en forma precisa de átomos y moléculas para la fabricación de productos a nanoescala. En vista a emplear el hidrógeno como combustible resulta de interés almacenarlo, conducirlo, y detectarlo, a escala nanométrica. Conducirlo en forma gaseosa por nanotubos de carbono, almacenarlo en nanocontenedores de grafeno, y detectarlo en nanopartículas y/o nanocables de paladio. Las simulaciones atómicas resultan herramientas fundamentales para estudiar estos sistemas. En particular la dinámica molecular (MD) consigue que átomos y moléculas interactúen por un período de tiempo, permitiendo una visualización del movimiento de las partículas. Esta técnica fue concebida dentro de la física teórica y actualmente es ampliamente utilizada en el campo de la biofísica y la ciencia de materiales. La MD resulta ser una herramienta de diseño en nanotecnología, permitiendo predecir el comportamiento molecular de los dispositivos en la nanoescala. Por medio de MD nos proponemos estudiar la interacción del H con nanoestructuras de C y Pd. Nos interesa estudiar la interacción de moléculas de hidrógeno H<sub>2</sub> con nanotubos, y nanocontenedores de grafeno. Calcular parámetros importantes para la descripción del gas como distribuciones de energías y velocidades. Valores medios, rms, más probables, y determinar la presión dentro de los nanocontenedores. Evaluar el stress de la nanoestructura de C y su reactividad química. Se propone estudiar procesos de hidruración en nanocables y nanopartículas de Pd, calcular isotermas de absorción de H para distintos radios, temperaturas. Analizar efectos de segregación de H y propiedades mecánicas. Se pretende además la implementación de cálculos de MD en Zr, NiAlH, y metano almacenado en nanoestructuras de C.

#### 4. Programa

Materiales

#### 5. Proyecto

Tipo de Proyecto: PID EQUIPOS EN CONSOLIDACIÓN CON INCENTIVOS TIPO A

Tipo de Actividad: Investigación Básica

#### Campos de Aplicación:

Rubro	Descrip. Actividad	Otra (especificada)
ENERGIA (Producción)	Combustibles	
PROMOCION GENERAL DEL CONOCIMIENTO	Ciencia exactas y naturales	

#### Disciplinas Científicas:

Rubro	Disciplina Científica	Otras Disciplinas Científicas
FÍSICA	Física atómica y molecular	-
QUÍMICA	Fisicoquímica	-

#### Palabras Clave

Dinámica Molecular, Nanoestructuras C-Pd-H.

#### 6. Fechas de realización

Inicio	Fin	Duración	Fecha de Homologación
01/01/2022	31/12/2024	36 meses	-

#### 7. Aprobación/ Acreditación / Homologación / Reconocimiento (para ser completado por la SCTyP - Rectorado)

7.1 Aprobación / Acreditación / Reconocimiento (para ser completado por la FR cuando se posea N° Resolución)  
N° de Resolución de aprobación de la FR: 039/2021

7.2 Homologación (para ser completado por la SCTyP - Rectorado)

**8. Estado (para ser completado por la SCTyP - Rectorado)**

EN TRÁMITE: EVALUACIÓN EXTERNA

**9. Aavales (presentación obligatoria de aavales)**

Del Decano de la FRN Ing. Pablo Oscar Liscovsky. Del Secretario de Investigación de la FRN Ing. Gustavo Monte.

**10. Personal Científico Tecnológico que participa en el PID**

Apellido	Nombre	Cargo	Hs/Sem	Fecha Alta	Fecha Baja	Otros Cargos	Cargo docente	Año cargo docente	Categ. Investigador Universitario	Categ. Prog. Incentivos	
CRESPO	EDUARDO ARIEL	DIRECTOR	12	01/01/2022	31/12/2024		Profesor Adjunto	2010	Ninguna	Investigador III	<a href="#">Descargar CV</a>
CANZONIERI	SALVADOR HUMBERTO	CO-DIRECTOR	10	01/01/2022	31/12/2024		Profesor Titular	2009	Ninguna	Investigador II	<a href="#">Descargar CV</a>
GONZALEZ	JUAN MANUEL	INVESTIGADOR FORMADO	5	01/01/2022	31/12/2024		Ayudante de 1ra	2018	Ninguna	Ninguna	<a href="#">Descargar CV</a>
OROZCO	MIRTHA AZUCENA	INVESTIGADOR FORMADO	5	01/01/2022	31/12/2024		Jefe de Trabajos Prácticos	2014	Ninguna	Investigador IV	<a href="#">Descargar CV</a>
RIVEAUD	LEONARDO ESTEBAN	INVESTIGADOR FORMADO	5	01/01/2022	31/12/2024				Ninguna	Ninguna	<a href="#">Descargar CV</a>

**11. Datos de la investigación****Estado actual de concimiento del tema**

La nanotecnología es la manipulación de la materia a escala nanométrica, esto es, que alguna de las dimensiones del sistema se encuentre entre 1 a 100 nm (un nanómetro equivale a  $10^{-9}$  de metro). Para éstas dimensiones, pueden prevalecer efectos cuánticos que brinden al material propiedades novedosas y especiales que puedan resultar de interés tecnológico. Además existe la llamada nanotecnología molecular que implica la manipulación en forma precisa de átomos y moléculas para la fabricación de productos a nanoescala.

Un sistema nanométrico puede presentarse en varias morfologías: nanopartículas, nanofilms, nanotubos, nanohorns, conos, discos, nanofluidos, etc. Además estos sistemas poseen una proporción de átomos en superficie muy elevada, resultando óptimos para procesos como los controlados por cinética molecular, procesos de difusión superficial, reacciones químicas, detección de hidrógeno (H) en superficies, etc.

En vista a emplear el H como combustible resulta de interés almacenarlo, conducirlo, y detectarlo a escala nanométrica. Por ejemplo conducirlo en forma gaseosa por nanotubos y almacenarlo en nanobotellas de grafeno (nanohorns). El grafeno es un arquetipo de los materiales nano, resulta 200 veces más fuerte que el acero y 5 veces más liviano que el aluminio, además de ser muy flexible elástico y transparente; se trata de una monocapa atómica de C en una red hexagonal.

Es de interés tecnológico también poder detectar H; son dispositivos óptimos para la detección las nanopartículas y/o nanocables de paladio (Pd). El Pd es un metal de transición del grupo del platino; blando, dúctil, maleable. El Pd puede absorber reversiblemente gran cantidad de H en su interior alojándolo en forma intersticial en su red cristalina en un rango amplio de temperaturas.

La detección de H es un fenómeno superficial, entonces una nanopartícula, nanocable, o nanofilm de Pd podrá detectar H a presiones extremadamente bajas, por la elevada cantidad de átomos donde el H pueda adsorberse en la superficie.

Desde principios de los años 50, las simulaciones por ordenador se han utilizado para estudiar las propiedades de diferentes materiales, así como los procesos que se hacen en ellos. Gracias a la potencia de cálculo de los ordenadores actuales y al desarrollo de algoritmos numéricos cada vez más eficientes, las simulaciones por ordenador se han convertido en una poderosa herramienta para estudiar sistemas complejos. Son además un nexo entre los modelos teóricos y resultados experimentales permitiendo determinar comportamientos, parámetros, y magnitudes; que no pueden ser obtenidos experimentalmente. Incluso sustituir el experimento cuando este fuese irrealizable, simulación predictiva.

Las simulaciones atomísticas resultan fundamentales para estudiar sistemas nanométricos. En particular la dinámica molecular (MD) consigue que átomos y moléculas interactúen por un período de tiempo, permitiendo una visualización del movimiento de las partículas. Esta técnica fue concebida dentro de la física teórica y actualmente es ampliamente utilizada en el campo de la biofísica y la ciencia de materiales. La MD resulta ser una herramienta de diseño en nanotecnología, permitiendo predecir el comportamiento molecular de los dispositivos en la nanoescala.

Por medio de dinámica molecular puede estudiarse nanoestructuras de C y Pd en aplicaciones de almacenamiento de H. Obtenerse datos que pueden ser comparados con valores experimentales, e información no accesible por

esta vía. Pudiéndose inclusive simular nanoestructuras de dimensiones del orden de las sintetizadas en trabajos experimentales.

#### Grado de Avance

Este PID pretende ser una continuación de los anteriores donde ya abordamos parcialmente estos temas. Producto de esas actividades surgieron las siguientes publicaciones y participaciones en congresos.

#### Publicaciones

**Hydrogen effects on the mechanical properties of nanocrystalline free-standing Palladium thin films.** M. L. Alí, E. A. Crespo, M. Ruda, S. B. Ramos. *International Journal of Hydrogen Energy* **45** (2020) 15213-15225. (<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.03.225>). ISSN 0360-3199.

**Hidrógeno en nanocables de paladio.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos, E. M. Bringa, F. U. Braschi. *Rumbos Tecnológicos UTN FRA* (2019) **11**. 1-8. ISSN 1852-7701. (<http://rumbostecnologicos.utnfrainvestigacionyposgrado.com/tipo-de-articulo/articulos/hidrogeno-en-nanocables-de-paladio/>)

**Almacenamiento de H<sub>2</sub> a escala nanométrica, un estudio por dinámica molecular.** E. A. Crespo, F. U. Braschi, E. M. Bringa. *Rumbos Tecnológicos UTN-FRA*. (2018) **10**. 9-15. ISSN 1852-7701. (<http://rumbostecnologicos.utnfrainvestigacionyposgrado.com/volumenes/rumbos-10/almacenamiento-de-h2-a-escala-nanometrica-un-estudio-por-dinamica-molecular/>)

**H<sub>2</sub> dentro de nanotubos de C.** E. A. Crespo, E. M. Bringa, F. U. Braschi. Libro de resúmenes extendidos de 18º Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2018. (2018) 615-617. ISBN 978-987-1323-62-3.

**Hidrógeno en nanocables de Pd.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos, E. M. Bringa, F. U. Braschi. Libro de resúmenes extendidos de 18º Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2018. (2018) 612-614. ISBN 978-987-1323-62-3.

**Efecto del hidrógeno en las propiedades mecánicas de membranas de paladio nanoestructurado.** M. L. Alí, S. B. Ramos, E. A. Crespo, E. M. Bringa, M. M. Ruda. Libro de resúmenes extendidos de 18º Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2018. (2018) 1300-1302. ISBN 978-987-1323-62-3.

**Hydrogen absorption in Pd thin-films".** S. B. Ramos, E.A. Crespo, F.U. Braschi, E.M. Bringa, M.L. Alí, M. Ruda. *International Journal of Hydrogen Energy*. 39(2014) 8590-8595. (ISSN 0360-3199).

**Hydrogen absorption in Pd nanoparticles of different shapes"** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos de Debiaggi, E. M. Bringa, F. U. Braschi, G. Bertolino. *International Journal of Hydrogen Energy*. 27(2012) 14831-14837 (ISSN 0360-3199).

**Thermodynamics of hydrogen in Pd nanoparticles.** E. A. Crespo, S. Claramonte, M. M. Ruda, S. B. Ramos. *International Journal of Hydrogen Energy*. **35**(2010) 6037-6041 (ISSN 0360-3199).

**Atomistic Modeling of H absorption in Pd nanoparticles.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos. *Journal of Alloys and Compounds*, On-line: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.10.064>. ISSN 0925-8388. (2010)

**Hydrogen absorption in Ni and Pd: a study based on atomistic calculations.** E.A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos. *International Journal of Hydrogen Energy*. Diciembre de 2007, 33(2008) 3561-3565. ISSN 0360-3199.

Absorción de hidrógeno en Ni y Pd: estudio basado en cálculos atomísticos. E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos. Publicación en *Proceedings del 2º Congreso Nacional – 1º Congreso Iberoamericano HIDRÓGENO Y FUENTES SUSTENTABLES DE ENERGÍA* 12-15 de Junio de 2007. Posadas, Misiones. ISBN978-987-1323-05-0

## Participaciones en Congresos

**H<sub>2</sub> dentro de SWNTs.** F. U. Braschi, E. A. Crespo, M. A. Orozco S. H. Canzonieri, J. M. Gonzalez. 104<sup>º</sup> Reunión de la Asociación de Física Argentina (RAFA-2019). Santa Fe Capital del 30/09/2019 al 3/10/2019.

**Efecto del hidrógeno en las propiedades mecánicas de membranas de paladio nanoestructurado.** M. L. Alí, S. B. Ramos, E. A. Crespo, E. M. Bringa, M. M. Ruda. 18<sup>º</sup> Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2018. ((1 al 5 de Octubre) Instituto Balseiro CNEA San Carlos de Bariloche.

**Hidrógeno en nanocables de Pd.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos, E. M. Bringa, F. U. Braschi. 18<sup>º</sup> Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2018. ((1 al 5 de Octubre) Instituto Balseiro CNEA San Carlos de Bariloche.

**H<sub>2</sub> dentro de nanotubos de C.** E. A. Crespo, E. M. Bringa, F. U. Braschi. 18<sup>º</sup> Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET 2018. ((1 al 5 de Octubre) Instituto Balseiro CNEA San Carlos de Bariloche.

**Isotermas de absorción de H en nanocables de Pd.** E. A. Crespo, S. B. Ramos, M. M. Ruda, E. M. Bringa, F. U. Braschi. 3<sup>ras</sup> Jornadas de Investigación y Posgrado. Facultad de Ingeniería Universidad Nacional del Comahue. Neuquén 6 y 7 de Noviembre 2017.

**Transporte de H<sub>2</sub> en nanotubos de C.** F. U. Braschi, E. M. Bringa, E. A. Crespo. 3<sup>ras</sup> Jornadas de Investigación y Posgrado. Facultad de Ingeniería Universidad Nacional del Comahue. Neuquén 6 y 7 de Noviembre 2017.

**Isotermas de absorción de H en nanocables de Pd.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos, E. M. Bringa, F. U. Braschi. VII Reunión Nacional de Sólidos, Bahía Blanca Buenos Aires Argentina, 22-24 Noviembre 2017. Universidad Nacional del Sur.

**Almacenamiento de H<sub>2</sub> a escala nonométrica.** E. A. Crespo, E. M. Bringa, F. U. Braschi, E. E. Mendez. Nano 2017, 22 al 24 de Mayo 2017, Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche.

**Estudio del comportamiento elástico de films nanoestructurados de Pd mediante simulaciones atomísticas.** M. L. Alí, M. M. Ruda, E. A. Crespo, E. M. Bringa, S. B. Ramos. Nano 2017, 22 al 24 Mayo de 2017, Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche.

**Efectos de tamaño y de la absorción de hidrógeno en las propiedades mecánicas de nanoestructuras de paladio: Estudio basado en Simulaciones Atomísticas.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, M. L. Alí, F. U. Braschi, S.B. Ramos, E. M. Bringa. 101<sup>º</sup> Reunión de la Asociación de Física Argentina, 4 al 7 de Octubre de 2016, San Miguel de Tucumán Argentina.

**Caracterización de los Nanohorns de grafeno como contenedores de gas de hidrógeno.** E. A. Crespo, E. M. Bringa, F. U. Braschi, J. M. Gonzalez, E. Vidal, L. Nuñez, E. E. Mendez. 101<sup>º</sup> Reunión de la Asociación de Física Argentina, 4 al 7 de Octubre de 2016, San Miguel de Tucumán Argentina.

**Termodinámica de la absorción de hidrógeno en nanoestructuras metálicas.** M. L. Alí, Ruda M., Crespo E. A., Bringa E. M., Braschi F. U., 2<sup>º</sup> Jornadas de Investigación y Posgrado, 9 y 10 de Noviembre de 2015 FAIN UNCO Neuquén.

**Nanohorns de grafeno (SWNH) como contenedores de H<sub>2</sub>.** E. A. Crespo, F. U. Braschi, J. M. Gonzalez, E. Vidal, L. Nuñez, E. E. Bringa. 100<sup>o</sup> Reunión Nacional de la Asociación de Física Argentina, 22 al 25 de Septiembre de 2015 en la ciudad de Villa Merlo, San Luis Argentina.

**Simulación atomística de propiedades mecánicas de nanomembranas de paladio con hidrógeno.** M. M. Ruda, S.B. Ramos, E. A. Crespo, E. M. Bringa, M. L. Alf, F. U. Braschi. CONAMET/SAM 2015, 15<sup>o</sup> Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales. 17-20 de Noviembre, Concepción Chile.

Simulación atomística de la influencia del H en curvas tensión-deformación de Pd nanocristalino. E. A. Crespo, S. B. Ramos, M. M. Ruda, E. M. Bringa, F. U. Braschi, M. L. Alf. **98<sup>a</sup> Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina (AFA-2013).24 al 27 de septiembre de 2013** Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche, Argentina.

**Simulaciones atomísticas de absorción de hidrógeno en nano-membranas de Pd.** S.B. Ramos, E. A. Crespo, F. U. Braschi, E. M. Bringa, M. M. Ruda, M. L. Alf. 5to. Congreso Nacional - 4to. Congreso Iberoamericano HIDRÓGENO Y FUENTES SUSTENTABLES DE ENERGÍA (HYFUSEN 2013) Córdoba, Argentina, 10 - 14 de junio de 2013

**Hiduración de nanofilms de Pd mono y policristalinos.** E. A. Crespo, F. U. Braschi, E. M. Bringa, S. B. Ramos, M. M. Ruda 97<sup>o</sup> Reunión Nacional de Física Argentina (AFA-2012). 25 al 26 de Septiembre, Villa Carlos Paz, Córdoba Argentina.

**Análisis del mecanismo de hidruración subsuperficial en Pd Nanocristalino.** E. A. Crespo, S. B. Ramos, M. M. Ruda; X Encuentro CNEA Superficies y Materiales Nanoestructurados, 11-14 de Mayo de 2010; Centro Atómico Bariloche, Bariloche.

**Absorción de hidrógeno en nanofilms y nanopartículas de paladio.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, E. M. Bringa, F. U. Braschi, S. B. Ramos, G. Bertolino. Hidrógeno y Fuentes Sustentables de Energía, 4to Congreso Nacional – 3er Congreso Iberoamericano (Hyfusen 2011), 6-9 Junio de 2011, Mar del Plata Argentina.

**Mecanismos de hidruración en Pd nanocristalino: comparación de resultados de simulaciones por dinámica molecular y por Monte Carlo.** E. A. Crespo, S. B. Ramos, E. M. Bringa, M. M. Ruda. 95<sup>a</sup> Reunión Nacional de Física (AFA2010) 28/9- 1/10 del 2010 Malargüe Mendoza.

**Atomistic Modeling of H absorption in Pd nanoparticles.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos. 15th. International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials, 6-10 de Julio de 2008. Buenos Aires.

**Propiedades termodinámicas de H en nanopartículas de Pd. Estudio basado en simulaciones atomísticas.** E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos de Debiaggi, 93<sup>o</sup> Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina. XI<sup>o</sup> Reunión de la Sociedad Uruguaya de Física, del 15 al 19 de Septiembre de 2008, Buenos Aires, Argentina.

**Absorción de hidrógeno en Ni y Pd: estudio basado en cálculos atomísticos.** E. A. Crespo, M. Ruda y S. Ramos de Debiaggi, Segundo Congreso Nacional y Primer Congreso Iberoamericano de Hidrógeno y Fuentes Sustentables de Energía. 12-15 de Junio de 2007, Posadas, Misiones.

**Cálculos atomísticos de absorción de H en nanopartículas de Níquel.**, E. A. Crespo, M. M. Ruda, S. B. Ramos. Jornadas de Física 2005, Instituto Balseiro, Diciembre de 2005

**Absorción de hidrógeno en nanopartículas de Níquel.** Asociación Física Argentina (AFA2005), La Plata 2005, E. A. Crespo, S. B. Ramos, M. M. Ruda.

## Objetivos de la investigación

Nos proponemos implementar cálculos de dinámica molecular (MD) en código LAMMPS [1] en nanoestructuras que primariamente podemos clasificar por su composición:

### (a) Nanoestructuras C-H

Sumio Iijima y colaboradores en el año 1999 [2,3] sintetizan los llamados nanohorns y nanotubos de carbono. Los nanohorns también conocidos por las siglas SWNHs (Single walled nanohorns) son nanoestructuras de grafeno que a veces toman formas similares a botellas. Los nanotubos de carbono SWNTs (Single walled nanotubes) resultan ser tubos de grafeno de diámetro nanométrico, esto significa que sólo una dimensión es macroscópica en este sistema. Los SWNTs y los SWNHs podrían emplearse para transporte y almacenamiento de H<sub>2</sub> a escala nanométrica [4].

En el PID anterior se implementaron cálculos de MD en SWNHs y SWNTs con H<sub>2</sub> en su interior, en algunas condiciones de densidad y temperatura. En este PID quisiéramos refinar estos cálculos en lo referido a la configuración de los potenciales empleados, y diversificar las morfologías de las nanoestructuras de C, involucrando ahora fullerenos, SWNHs con otras geometrías, SWNTs con distintas quiralidades, y nanotubos de pared múltiple (MWNT).

Se pretende calcular por MD parámetros importantes para la descripción del sistema como distribuciones de energías y velocidades, valores representativos como valores medios, rms, más probables, desviaciones estándar, densidades y presiones de H<sub>2</sub> en función de la temperatura. Evaluar cómo se comportan químicamente la nanoestructura de C y su stress.

### b) Nanoestructuras Pd-H

El Pd resulta muy ávido de H que lo absorbe en forma atómica ocupando abundantemente los sitios intersticiales en su red fcc en un amplio rango de temperaturas. También lo absorbe abundantemente en defectos y bordes de grano. De allí que se lo emplee en detección de este elemento. La hidruración del Pd es una transición de fase que involucra un cambio discontinuo del parámetro de red, desde un valor de 3.88 Å en una fase con poco contenido de H, a 4.02 Å en la fase hidruro.

Para caracterizar procesos de absorción de H, resultan de gran interés las isothermas de absorción de H. En éstas se grafica la presión de gas o el potencial químico equivalente en función de la concentración atómica H/Pd. Las isothermas de absorción de hidrógeno en Pd pueden ser obtenidas experimentalmente en material bulk y sistemas nanométricos [5-7]. También pueden ser calculadas teóricamente [8-14].

En el PID anterior se implementaron cálculos de MD en hidruración en nanocables y nanofilms mono y policristalinos de Pd [15]. En este nuevo PID se propone ampliar a otros espesores de nanocables y nanofilms, e incluir nanopartículas de Pd.

Se pretende calcular por MD isothermas de absorción de H a varias temperaturas. Simulando ensayos de tracción se pueden obtener constantes elásticas para varios estados de hidruración. Se analizarán los efectos de segregación de H superficial y acumulación en defectos y bordes de grano.

### (c) Implementación de cálculos en MD en otros compuestos

En vías de diversificar en el futuro próximo el tipo de elementos a simular, surge el interés de implementar otros potenciales en nuestros cálculos de MD. Realizamos ya algunas experiencias con potenciales de Zr [16] en material bulk. Se simuló ensayos de tracción y se calcularon constantes elásticas. Se aspira en este PID sistematizar estos cálculos en nanopartículas, nanocables, y nanofilms de Zr.

Otro sistema de interés es el NiAlH [17], este sistema además de resultar atractivo por ser ternario vuelve a contener H. Se planea la implementación del cálculo de isothermas de absorción de H en nanopartículas de NiAl.

Finalmente, también es de nuestro interés, simular empujado MD, el almacenamiento de metano en SWNT.

Estamos en este momento empezando a implementar un taller LAMMPS (online) donde los alumnos participan en el desarrollo de los cálculos. Siendo un objetivo de esta actividad que lleven sus logros a congresos científicos. Otro claro objetivo del taller es captar alumnos para trabajar en este PID.

## Descripción de la metodología

**Metodología objetivo (a) nanoestructuras C-H:** Realizaremos simulaciones de dinámica molecular utilizando el código LAMMPS y modelando las interacciones interatómicas con potenciales carbono hidrógeno AIREBO [18]. En los nanotubos de grafeno se extienden convenientemente las condiciones periódicas convirtiéndolos virtualmente en infinitos. Se emplea un ensamble NPT, donde resultan constantes el número de partículas N, la presión P, y la temperatura T, siendo variables el volumen y la energía del sistema

Las coordenadas iniciales de algunas nanobotella de grafeno nos fueron suministradas por el Dr. Piotr Kowalczyk del Nanochemistry Research Institute, Curtin University Perth Australia [19]. En estos casos se emplea un ensamble NVE donde resultan constantes el número de partículas N, la energía E, y el volumen V (grande) que contiene a la

nanobotella, siendo variables la temperatura y la presión. Online también pueden encontrarse coordenadas de inicio de fullerenos y nanotubos con distintas quiralidades.

Se evalúa el stress atómico [20] en las nanoestructuras de grafeno; los átomos más tensionados pueden ser puntos de nucleación de condensación de gas a bajas temperaturas y de reacciones químicas a temperaturas más elevadas.

**Metodología objetivo (b) nanoestructuras Pd-H:** Se emplean técnicas de DM y de Monte Carlo (MC), implementadas en código LAMMPS con potenciales de átomo embebido (EAM) [21]. Cada cierto número de pasos de simulación, se inicia un MC en el ensamble gran canónico (NPTm), donde se mantienen constantes el número de átomos de Pd (N), la presión (P), la temperatura (T), y el potencial químico del H (m) en equilibrio con un reservorio de gas, mientras que resultan variables el número de átomos de H, el volumen, y la energía del sistema.

Las curvas de tracción-deformación se calculan por DM utilizando un termostato/barostato de Nose-Hoover.

**Metodología objetivo (c) Implementación de cálculos MD en nuevos compuestos:** Se implementarán potenciales de Zr y NiAlH en cálculos MD en bulk y nanoestructuras.

#### Referencias:

- [1] "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics". Plimpton S.J., *Comp Phys* (1995). 117, 1-19.
- [2] "Nano-aggregates of single-walled graphitic carbon nanohorns". Iijima S, Yudasaka M, Yamada R., Bandow S., Suenaga K., Kokai F., Takahashi K., (1999). *Chem. Phys. Lett.* 309 (3-4): 165-170.
- [3] "Interlayer spacing anomaly of single-wall carbon nanohorn aggregate". Bandow S., Kokai F., Takahashi K., Yudasaka M., Qin LC., Iijima S., (2000). *Chem. Phys. Lett.* 321 (5-6): 514-519.
- [4] "Almacenamiento de H<sub>2</sub> a escala nanométrica, un estudio por dinámica molecular". Crespo E. A., Braschi F. U., Bringa E. M., *Rumbos Tecnológicos* (2018) 10. 9-15 ISSN 18527701. (<http://rumbostecnologicos.utnfrainvestigacionyposgrado.com/volumenes/rumbos-10/almacenamiento-de-h2-a-escala-nanometrica-un-estudio-por-dinamica-molecular/>).
- [5] "Hydrogen absorption of nanocrystalline palladium". Kuji T., Matsumura Y., Uchida H., Aizawa T., *Journal of Alloys and Compounds*. 330-332 (2002) 718-722.
- [6] "Hydrogen and Pd-clusters" Pundt A., Suleiman M., Bähzt C, Reetz M. T., Kirchheim R., Jisrawi N.M. *Materials Science Engineering B*; 108(2004)19-23.
- [7] "Thermodynamics of hydrogen solution and hydride formation for different microstructures of Pd". Luo S., Flanagan T. B., *Journal Alloys and Compounds* 330-332 (2002) 29-33.
- [8] "Pressure composition isotherms for palladium hydride". Wolf R., Lee M.W. y Davis R.C., *Phys. Rev. B* (1993)48(17): 12415-12418.
- [9] "Hydrogen absorption in Ni and Pd: a study based on atomistic calculations", Crespo E. A., Ruda M., Ramos S. B. *International Journal of Hydrogen Energy*. 33(2008) 3561-3565.
- [10] "Absorción de hidrógeno en Ni y Pd: estudio basado en cálculos atomísticos", Crespo E. A., Ruda M. Ramos S., B. Publicación en *Proceedings del 2º Congreso Nacional – 1º Congreso Iberoamericano HIDRÓGENO Y FUENTES SUSTENTABLES DE ENERGÍA* 12-15 de Junio de 2007. Posadas, Misiones.
- [11] "Atomistic Modeling of H absorption in Pd nanoparticles", Crespo E., Ruda M. y Ramos de Debiaggi S. *Journal of Alloys and Compounds*, On-line: <http://dx.doi.org/10.1>
- [12] "Thermodynamics of hydrogen in Pd nanoparticles". Crespo E.A., Claramonte S., Ruda M. and Ramos de Debiaggi S. *International Journal of Hydrogen Energy* 35(2010) 6037-6041.
- [13] "Hydrogen absorption in Pd nanoparticles of different shapes". Crespo E. A., Ruda M., Ramos de Debiaggi S., Bringa E. A., Braschi F. U., Bertolino G. *International Journal of Hydrogen Energy*. 27(2012) 14831-14837.
- [14] "Hydrogen absorption in Pd thin-films". S. Ramos de Debiaggi, E.A. Crespo, F.U. Braschi, E.M. Bringa, M.L. Alf, M. M. Ruda. *International Journal of Hydrogen Energy* 39(2014) 8590-8595.
- [15] "Hydrogen effects on the mechanical properties of nanocrystalline free-standing Palladium thin films". M. L- Alf, E. A. Crespo, M. Ruda, S. B. Ramos. *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (2020) 15213-15225. (<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.03.225>). ISSN 0360-3199.
- [16] Mendeleev and Ackland, *Phil Mag Lett* 87, 349-359 (2007)

[17] Moody and Baskes, Modell Sim Mater Eng, 3, 289-307 (1995)

[18] "A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions" Stuart S.J., Tutein J.A., Harrison A. J., Chem. Phys. 112(2000) 6472-6486.

[19] "Toward in silico modeling of palladium hydrogen-carbon nanohorns nanocomposites". Kowalczyk P., Phys.Chem.Chem.Phys.16 (2014) 11763.

[20] "Local stress calculation in simulations of multicomponent systems". Branicio P.S., Srolovitz D. J., J.Comput. Phys. (2009), 228:8467-79.

[21] "An embedded atom method interatomic potential for Pd-H alloys". Zhou X. W., Zimmerman J. A., Wong B.M., Hoyt J. J., J. Mater Res 2008, 23:704-18.

## 12. Contribuciones del Proyecto

### Contribuciones al avance científico, tecnológico, transferencia al medio

La nanotecnología resultan ser uno de los campos de la actividad científica tecnológica con mayor crecimiento y desarrollo en los últimos años. En nuestro país muchos grupos de investigación se han volcado a esta temática por su potencialidad. El desarrollo de este PID dentro de la Facultad Regional Neuquén nos permitirá participar en estos avances científicos tecnológicos.

### Contribuciones a la formación de Recursos Humanos

El desarrollo de la temática y actividades planteadas seguramente propiciará la formación de Recursos Humanos. Se planea involucrar alumnos a través de talleres online. Se pretende que las personas involucradas en el PID puedan tomar cursos y vincularse con investigadores de otros Institutos y/o Universidades.

## 13. Cronograma de Actividades

Año	Actividad	Inicio	Duración	Fin
1	Revisión bibliográfica.	01/01/2022	12 meses	31/12/2022
1	Trabajar en los objetivos (a), (b), y (c).	01/01/2022	12 meses	31/12/2022
1	Elaboración de los trabajos que se llevarán a congresos y reuniones científicas.	01/04/2022	9 meses	31/12/2022
1	Participar en cursos y talleres del tema.	01/04/2022	9 meses	31/12/2022
1	Elaboración de publicaciones.	31/05/2022	7 meses	30/12/2022
2	Revisión bibliográfica.	01/01/2023	12 meses	31/12/2023
2	Trabajar en los objetivos (a), (b), y (c).	01/01/2023	12 meses	31/12/2023
2	Elaboración de los trabajos que se llevarán a congresos y reuniones científicas.	01/02/2023	11 meses	31/12/2023
2	Participar en cursos y talleres del tema.	01/02/2023	11 meses	31/12/2023
2	Elaboración de publicaciones.	01/02/2023	11 meses	31/12/2023
3	Revisión bibliográfica.	01/01/2024	12 meses	31/12/2024
3	Trabajar en los objetivos (a), (b), y (c).	01/01/2024	12 meses	31/12/2024
3	Elaboración de los trabajos que se llevarán a congresos y reuniones científicas.	01/02/2024	11 meses	31/12/2024
3	Participar en cursos y talleres del tema.	01/02/2024	11 meses	31/12/2024
3	Elaboración de publicaciones.	01/02/2024	11 meses	31/12/2024
3	Actividades de cierre.	01/04/2024	9 meses	31/12/2024

## 14. Conexión del grupo de Trabajo con otros grupos de investigación en los últimos cinco años

Grupo Vinc.	Apellido	Nombre	Cargo	Institución	Ciudad	Objetivos	Descripción
Caracterización de propiedades físicas y químicas de moléculas, nanoestructuras metálicas, aleaciones e intermetálicos para tecnologías en desarrollo. (Código 04/238).	Ramos	Susana Beatriz	DIRECTOR	Dpto. Física FAIn UNCo	Neuquén	Elaboración de trabajos en conjunto.	Colaboración en general. Intercambio de software y data.
CAB CNEA	Ruda	Margarita	INVESTIGADOR FORMADO	CAB CNEA	Bariloche	Elaboración de trabajos en conjunto.	Colaboración en general. Intercambio de software y data
CONICET	Bringa	Eduardo Marcial	INVESTIGADOR FORMADO	CONICET. Univ. de Mendoza. CNA Univ. Mayor Chile.	Mendoza	Elaboración de trabajos en conjunto.	Colaboración en general.

## 15. Presupuesto

Total Estimado del Proyecto: \$ 340000,00

### 15.1. Recursos Humanos - Inciso 1 e Inciso 5

Primer Año



Becarios Inciso 5	Cantidad	Pesos	Origen del financiamiento	
1. Becario Alumno Fac.Reg.	0	\$ 0,00	-	-
2. Becario Alumno UTN-SAE	0	\$ 0,00	-	-
3. Becario Alumno UTN-SCTyP	0	\$ 0,00	-	-
4. Becario BINID	0	\$ 0,00	-	-
5. Becario Posgrado-Doctoral en el país	0	\$ 0,00	-	-
6. Becario Posgrado Doctoral en el extranjero	0	\$ 0,00	-	-
7. Becario Posgrado - Especialización	0	\$ 0,00	-	-
8. Becario Posgrado - Maestría en el país	0	\$ 0,00	-	-
9. Becario Posgrado - Maestría en el extranjero	0	\$ 0,00	-	-

Docentes Investigadores y Otros - Inciso 1	Cantidad	Pesos
1.Administrativo	0	\$ 0,00
2.CoDirector	0	\$ 0,00
3.Director	0	\$ 0,00
4.Investigador de apoyo	0	\$ 0,00
5.Investigador Formado	0	\$ 0,00
6.Investigador Tesista	0	\$ 0,00
7.Otras	0	\$ 0,00
8.Técnico de Apoyo	0	\$ 0,00

Totales	Inciso 5	Inciso 1	Total
Primer Año	\$ 0,00	\$ 0,00	\$ 0,00

### Segundo Año

Becarios Inciso 5	Cantidad	Pesos	Origen del financiamiento	
1. Becario Alumno Fac.Reg.	0	\$ 0,00	-	-
2. Becario Alumno UTN-SAE	0	\$ 0,00	-	-
3. Becario Alumno UTN-SCTyP	0	\$ 0,00	-	-
4. Becario BINID	0	\$ 0,00	-	-
5. Becario Posgrado-Doctoral en el país	0	\$ 0,00	-	-
6. Becario Posgrado Doctoral en el extranjero	0	\$ 0,00	-	-
7. Becario Posgrado - Especialización	0	\$ 0,00	-	-
8. Becario Posgrado - Maestría en el país	0	\$ 0,00	-	-
9. Becario Posgrado - Maestría en el extranjero	0	\$ 0,00	-	-

Docentes Investigadores y Otros - Inciso 1	Cantidad	Pesos
1.Administrativo	0	\$ 0,00
2.CoDirector	0	\$ 0,00
3.Director	0	\$ 0,00
4.Investigador de apoyo	0	\$ 0,00
5.Investigador Formado	0	\$ 0,00
6.Investigador Tesista	0	\$ 0,00
7.Otras	0	\$ 0,00
8.Técnico de Apoyo	0	\$ 0,00

Totales	Inciso 5	Inciso 1	Total
Segundo Año	\$ 0,00	\$ 0,00	\$ 0,00

### Tercer Año

Becarios Inciso 5	Cantidad	Pesos	Origen del financiamiento	
1. Becario Alumno Fac.Reg.	0	\$ 0,00	-	-
2. Becario Alumno UTN-SAE	0	\$ 0,00	-	-
3. Becario Alumno UTN-SCTyP	0	\$ 0,00	-	-
4. Becario BINID	0	\$ 0,00	-	-
5. Becario Posgrado-Doctoral en el país	0	\$ 0,00	-	-
6. Becario Posgrado Doctoral en el extranjero	0	\$ 0,00	-	-
7. Becario Posgrado - Especialización	0	\$ 0,00	-	-
8. Becario Posgrado - Maestría en el país	0	\$ 0,00	-	-
9. Becario Posgrado - Maestría en el extranjero	0	\$ 0,00	-	-

Docentes Investigadores y Otros - Inciso 1	Cantidad	Pesos
1.Administrativo	0	\$ 0,00
2.CoDirector	0	\$ 0,00
3.Director	0	\$ 0,00
4.Investigador de apoyo	0	\$ 0,00
5.Investigador Formado	0	\$ 0,00
6.Investigador Tesista	0	\$ 0,00

7.Otras	0	\$ 0,00
8.Técnico de Apoyo	0	\$ 0,00

<b>Totales</b>	<b>Inciso 5</b>	<b>Inciso 1</b>	<b>Total</b>
Tercer Año	\$ 0,00	\$ 0,00	\$ 0,00

<b>TOTAL GENERAL</b>	<b>Inciso 5</b>	<b>Inciso 1</b>	<b>Total General</b>
Todo el Proyecto	\$ 0	\$ 0	\$ 0

#### 15.2 Bienes de consumo - Inciso 2

<b>Año del Proyecto</b>	<b>Financiación Anual</b>	<b>Solicitado a</b>
-	-	-
<b>Total en Bienes de Consumo</b>		<b>\$ 0,00</b>

#### 15.3 Servicios no personales - Inciso 3

<b>Año</b>	<b>Descripción</b>	<b>Monto</b>	<b>Solicitado a</b>
-	-	-	-
<b>Total en Servicios no personales</b>			<b>\$ 0,00</b>

#### 15.4 Equipos - Inciso 4.3 - Disponible y/o necesario

Año	Disp/Nec	Origen	Descripción	Modelo	Otras Espec.	Cantidad	Monto Unitario	Solicitado a
1	Necesario	-	PC ultima generación	i7	-	1,00	\$ 140.000,00	UTN - SCTyP
1	Necesario	-	Monitor PC	-	-	1,00	\$ 30.000,00	UTN - SCTyP
2	Necesario	-	PC ultima generación	i7	-	1,00	\$ 140.000,00	UTN - SCTyP
2	Necesario	-	Monitor PC	-	-	1,00	\$ 30.000,00	UTN - SCTyP
<b>Total en Equipos</b>							<b>\$ 340.000,00</b>	

#### 15.5 Bibliografía de colección - Inciso 4.5 - Disponible y/o necesario

Año	Disp/Nec	Origen	Descripción	Modelo	Otras Espec.	Cantidad	Monto Unitario	Solicitado a
1	Disponible	Publicaciones del tema Biblioteca de Ciencia y Técnica	Descarga libre	-	-	1,00	\$ 0,00	Organismos públicos nacionales (CONICET, Agencia, INTI, CONEA, etc.)
2	Disponible	Publicaciones del tema Biblioteca de Ciencia y Técnica	Descarga libre	-	-	1,00	\$ 0,00	Organismos públicos nacionales (CONICET, Agencia, INTI, CONEA, etc.)
3	Disponible	Publicaciones del tema Biblioteca de Ciencia y Técnica	Descarga libre	-	-	1,00	\$ 0,00	Organismos públicos nacionales (CONICET, Agencia, INTI, CONEA, etc.)
<b>Total en Bibliografía</b>								<b>\$ 0,00</b>

#### 15.6 Software - Disponible y/o necesario

Año	Disp/Nec	Origen	Descripción	Modelo	Otras Espec.	Cantidad	Monto Unitario	Solicitado a
1	Disponible	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator	Paquete de dinámica Molecular	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
1	Disponible	Ovito Open Visualization Tool	Visualizador 3D moléculas	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
1	Disponible	FORCE Fortran Project	Compilador Fortran	Actualización permanente online	-	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
2	Disponible	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator	Paquete de dinámica Molecular	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
2	Disponible	Ovito Open Visualization Tool	Visualizador 3D moléculas	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
2	Disponible	Force Fortran Project	Compilador Fortran	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
3	Disponible	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator	Paquete de dinámica Molecular	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
3	Disponible	Ovito Open	Visualizador 3D	Actualización	Software	4,00	\$ 0,00	Organismos /

		Visualization Tool	molécular	permanente online	Libre			Empresas Internacionales / Extranjeros
3	Disponible	FORCE Fortran Project	Compilador Fortarn	Actualización permanente online	Software Libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
<b>Total en Software</b>								<b>\$ 0,00</b>

#### 16. Co-Financiamiento

Año	RR.HH.	Bienes de Consumo	Equipamiento	Servicios no personales	Bibliografía	Software	Total
1	\$0,00	\$0,00	\$170.000,00	\$0,00	\$0,00	\$0,00	\$170.000,00
2	\$0,00	\$0,00	\$170.000,00	\$0,00	\$0,00	\$0,00	\$170.000,00
3	\$0,00	\$0,00	\$0,00	\$0,00	\$0,00	\$0,00	\$0,00
<b>Total del Proyecto</b>	<b>\$0,00</b>	<b>\$0,00</b>	<b>\$340.000,00</b>	<b>\$0,00</b>	<b>\$0,00</b>	<b>\$0,00</b>	<b>\$340.000,00</b>

#### Financiamiento de la Universidad

Universidad Tecnológica Nacional - SCyT	\$ 0,00
Facultad Regional	\$ 0,00

#### Financiamiento de Terceros

Organismos públicos nacionales (CONICET, Agencia, INTI, CONEA, etc.)	\$ 0,00
Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros	\$ 0,00
Entidades privadas nacionales (Empresas, Fundaciones, etc.)	\$ 0,00
Otros	\$ 0,00
<b>Total</b>	<b>\$ 0,00</b>

#### Avales de aprobación, Financiamiento y Otros

	Orden	Nombre de archivo	Tamaño
<a href="#">Descargar</a>	1	AvalesPIDCrespo.pdf	215283
<a href="#">Descargar</a>	2	ResolucionPIDCRESPO.pdf	197377
<a href="#">Descargar</a>	3	Anexo-V-DISP27-21.pdf	201673
<a href="#">Descargar</a>	4	Anexo-IV-DISP27-21.pdf	593510

#### Currículums (Currículums de los integrantes cargados en el sistema)

Imprimir

Exportar a PDF