



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: ASUTNDN0005141

1. Unidad Científico-Tecnológica

FR Neuquén - DEPARTAMENTO DE INGENIERIA ELECTRONICA - FRN

2. Denominación del PID

Dinámica Molecular en Nanoestructuras

3. Resumen Técnico del PID

La nanotecnología molecular 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. Estamos hablando de manipular hidrógeno en nanotecnología. Conducirlo en forma gaseosa por nanotubos de carbono, almacenarlo en nanocontenedores de grafeno, y detectarlo en nanopartículas y/o nanocables de paladio. Las simulaciones atomísticas resultan herramientas fundamentales para estudiar estos sistemas. En particular la dinámica molecular basada en potenciales clásicos resulta muy útil debido que, al ser un método semiempírico, permite computar hasta miles de átomos, labor que partiendo desde técnicas que involucren primeros principios resulta de un excesivo costo computacional. Por medio de la dinámica molecular nos proponemos estudiar la interacción del H con nanoestructuras de C y Pd. Nos interesa estudiar la interacción de moléculas de hidrógeno H₂ en estado gaseoso con placas, nanotubos, y nanocontenedores de grafeno. Calcular parámetros importantes para la descripción del gas como la energía, la velocidad cuadrática media de sus moléculas, y la presión para varias temperaturas. Evaluar cómo se comporta la nanoestructura de C, calcular su tensor de tensiones atómico y en qué condiciones reaccionan químicamente los átomos de C con el H₂. Nos proponemos estudiar procesos de hidruración en nanocables y nanopartículas de Pd, calcular isoterma de absorción de H para distintos radios, temperaturas, y estados de tensión. Analizar efectos de segregación de H y propiedades mecánicas Como logro de máxima nos interesa diseñar y caracterizar un nanoelectrodo para la detección de H, empleando un nanotubo de C con una nanopartícula de Pd a modo tapón en uno de sus extremos.

4. Programa

Análisis de Señales, Modelados y Simulación

5. Proyecto

Tipo de Proyecto: UTN (PID UTN) SIN INCORPORACION EN PROGRAMA INCENTIVOS

Tipo de Actividad: Investigación Básica

Campos de Aplicación:

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

Disciplinas Científicas:

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

Palabras Clave

Dinámica Molecular , Nanoestructuras C-Pd-H

6. Fechas de realización

Inicio	Fin	Duración	Fecha de Homologación
01/01/2019	31/12/2020	24 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: 064/18

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

Código SCTyP: ASUTNDN0005141

Disposición SCTyP:

Código Ministerio:

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

EN TRÁMITE

9. Aavales (presentación obligatoria de aavales)

10. Personal Científico Tecnológico que participa en el PID

Apellido y Nombre	Cargo	Hs/Sem	Fecha Alta	Fecha Baja	Otros Cargos
CANZONIERI, SALVADOR HUMBERTO	CO-DIRECTOR	10	01/01/2019	31/12/2020	-
CRESPO, EDUARDO ARIEL	DIRECTOR	15	01/01/2019	31/12/2020	-
GONZALEZ, JUAN MANUEL	INVESTIGADOR FORMADO	5	01/01/2019	31/12/2020	-
QUINTERO, SEBASTIAN	INVESTIGADOR ESTUDIANTE	2	01/01/2019	31/12/2020	-
VILLAR, CARLOS DANIEL	INVESTIGADOR ESTUDIANTE	2	01/01/2019	31/12/2020	-
OROZCO, MIRTHA AZUCENA	INVESTIGADOR FORMADO	5	01/01/2019	31/12/2020	-
INOSTROZA ARIAS, RAMIRO ISMAEL	INVESTIGADOR ESTUDIANTE	2	01/01/2019	31/12/2020	-

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.

Fué Richard Feynmann (Premio Nobel de Física 1965) el primero en hacer referencia a las posibilidades de la nanociencia y la nanotecnología en una conferencia en el Instituto Tecnológico de California (Caltech) el 29 de diciembre de 1959. El título de la conferencia fue **En el fondo hay espacio de sobra** (There's Plenty of Room at the Bottom); en ésta se describió la posibilidad de síntesis de la materia por vía de la manipulación directa de los átomos

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, reacciones químicas, detección de hidrógeno en superficies, etc.

En vista a emplear el hidrógeno como combustible resulta de interés almacenarlo, conducirlo, y detectarlo a escala nanométrica. Estamos hablando de manipular hidrógeno en nanotecnología. 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. El Pd es un metal de transición del grupo del platino; blando, dúctil, maleable. Se parece químicamente al platino y se extrae de algunas minas de cobre y níquel. Se emplea en catalizadores y joyería. El Pd puede absorber 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 o un nanocable de Pd podrá detectar H a presiones extremadamente bajas, por la elevada cantidad de átomos donde el H pueda adsorberse en la superficie.

Las simulaciones atomísticas resultan herramientas fundamentales para estudiar estos sistemas. En particular la dinámica molecular basada en potenciales clásicos resulta muy útil debido que, al ser un método semiempírico, permite computar hasta miles de átomos, labor que partiendo desde técnicas que involucren primeros principios resulta de un excesivo costo computacional.

Por medio de la dinámica molecular puede estudiarse la interacción del H con nanoestructuras de C y Pd, obtenerse datos que pueden ser comparados con valores experimentales, y además obtener información no accesible por vía experimental. La aparición de computadoras de gran capacidad permite, sin excesivo costo, simular nanoestructuras de dimensiones del orden de las sintetizadas en trabajos experimentales.

Grado de Avance

En trabajos anteriores dentro del grupo de investigación que dirige la Dra. Ramos S. B. de CONICET PROBIEN - FAIN-UNCOMA (Facultad de Ingeniería Universidad Nacional del Comahue), hemos trabajado ampliamente en el cálculo de isothermas y procesos de absorción de H en nanopartículas y nanofilms de Pd:

- 1) "**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.
- 2) "**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.
- 3) "**Atomistic Modeling of H absorption in Pd nanoparticles**", Crespo E., Ruda M. y Ramos de Debiaggi S. Journal of Alloys and Compounds, On-line:
- 4) "**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.
- 5) "**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.
- 6) "**Hydrogen absorption in Pd thin-films**". S. Ramos de Debiaggi, E.A. Crespo, F.U. Braschi, E.M. Bringa, M.L. Alí, M. Ruda. International Journal of Hydrogen Energy 39(2014) 8590-8595.

Además dentro del PID Físicoquímica de Nanoestructuras (FQN) llevado a cabo en la UTN-FRN que vence a fin del presente año, comenzamos a trabajar estos temas y producto de estas actividades asistimos a las siguientes reuniones científicas:

- 1) "**Simulación atomística de propiedades mecánicas de nanomembranas de paladio con hidrógeno**" M. Ruda, S.B. Ramos, E. A. Crespo, E. M. Bringa, M. L. Alí, F. U. Braschi. CONAMET/SAM 2015, 15º Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales. 17-20 de Noviembre, Concepción Chile.
- 2) "**Nanohorns de grafeno (SWNH) como contenedores de H₂**" Crespo E. A., Braschi F. U., Gonzalez J. M., Vidal E., Nuñez L., Bringa E. E.. 100º Reunión Nacional de la Asociación de Física Argentina, 22 al 25 de Septiembre de 2015 en la ciudad de Villa Merlo, San Luis Argentina.
- 3) "**Termodinámica de la absorción de hidrógeno en nanoestructuras metálicas**" Alí M. L., Ruda M., Crespo E. A., Bringa E. M., Braschi F. U.. 2º Jornadas de Investigación y Posgrado, 9 y 10 de Noviembre de 2015 Facultad de Ingeniería Universidad Nacional del Comahue (FAIN UNCo) Neuquén Argentina.
- 4) "**Caracterización de los Nanohorns de grafeno como contenedores de gas de hidrógeno**" Crespo E. A., Bringa E. M., Braschi F. U., Gonzalez J. M., Vidal E., Nuñez L, Mendez E. E. 101º Reunión de la Asociación de Física Argentina, 4 al 7 de Octubre de 2016, San Miguel de Tucumán Argentina.
- 5) "**Efectos de tamaño y de la absorción de hidrógeno en las propiedades mecánicas de nanoestructuras de paladio: Estudio basado en Simulaciones Atomísticas**" Crespo E. A., Ruda M., Alí M. L., Braschi F. U., Ramos S. B., Bringa E. M. 101º Reunión de la Asociación de Física Argentina, 4 al 7 de Octubre de 2016, San Miguel de Tucumán Argentina.
- 6) "**Estudio del comportamiento elástico de films nanoestructurados de Pd mediante simulaciones atomísticas**" M.L. Alí, 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 Argentina.
- 7) "**Almacenamiento de H₂ a escala nonométrica**" Crespo E. A., Bringa E. M., Braschi F. U. y Mendez E. E. Nano 2017, 22 al 24 de Mayo 2017, Centro Atómico Bariloche , San Carlos de Bariloche Argentina.
- 8) "**Isothermas de absorción de H en nanocables de Pd**". Crespo E. A., Ruda M. M., Ramos S. B., Bringa E. M., Braschi F. U.. VII Reunión Nacional de Sólidos, Bahía Blanca Buenos Aires Argentina, 22-24 Noviembre 2017. Universidad Nacional del Sur.
- 9) "**Transporte de H₂ en nanotubos de C**". Braschi F. U., Bringa E. M., Crespo E. A.. 3ras Jornadas de Investigación y Posgrado. Facultad de Ingeniería Universidad Nacional del Comahue Neuquén Argentina, 6 y 7 de Noviembre 2017.
- 10) "**Isothermas de absorción de H en nanocables de Pd**". Crespo E. A., Ramos S. B, Ruda M. M., Bringa E. M., Braschi F. U.. 3ras Jornadas de Investigación y Posgrado. Facultad de Ingeniería Universidad Nacional del Comahue Neuquén Argentina, 6 y 7 de Noviembre 2017.

Objetivos de la investigación

Nos proponemos simular empleando dinámica molecular y código LAMMPS [1] nanoestructuras que primariamente podemos clasificar por su composición:

- a) C-H
- b) Pd-H
- c) C-Pd-H.

a) Nanoestructuras C-H

Sumio lijima 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 con forma de cuerno y a veces en forma de una botella, 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_2 a escala nanométrica.

Nos interesa estudiar la interacción de moléculas de hidrógeno H_2 en estado gaseoso con placas, nanotubos, y nanobotellas de grafeno. Se pretende calcular por dinámica molecular parámetros importantes para la descripción del gas como la energía, la velocidad cuadrática media de sus moléculas, y la presión para varias temperaturas.

También nos interesa evaluar cómo se comporta la nanoestructura de C, calcular su tensor de tensiones atómico y en qué condiciones reaccionan químicamente los átomos de C con el H_2 .

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 isotermas 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 isotermas de absorción de hidrógeno en Pd pueden ser obtenidas experimentalmente en material bulk y sistemas nanométricos [4-6]. También pueden ser calculadas teóricamente [7-13].

Nos proponemos estudiar procesos de hidruración en nanocables (NC) de Pd, por medio del cálculo de isotermas de absorción de H para distintos radios, temperaturas, y estados de tensión del NC. Analizar efectos de segregación de H que resultan ser muy importantes en estos sistemas, la hidruración comienza preferentemente formando una membrana de H subsuperficial y luego evolucionando hacia el interior del material. Pueden involucrarse en estos estudios otras morfologías como nanopartículas, nanofilms, etc., si oportunamente resultan de interés.

En vista a ser empleados para la detección de H, interesan las propiedades mecánicas de estos NC. Empleando técnicas de dinámica molecular pueden obtenerse curvas de tracción deformación. Nos proponemos para varios radios, concentraciones de H, y temperaturas, calcular dichas curvas de tracción deformación, obtener el módulo de Young y determinar el comportamiento mecánico de los NC.

c) Nanoestructuras C-Pd-H

Puede construirse un detector de H a escala nanométrica empleando un nanotubo de C con una nanopartícula de Pd a modo tapón en uno de sus extremos. Los H pueden ser absorbidos en el Pd producto de una reacción de reducción electroquímica, o podrían haber sido conducidos como H_2 gaseoso hasta el Pd por dentro del NT, etc.

Son múltiples las aplicaciones que podrían dársele y también son muchas las geometrías posibles según la aplicación nanotecnológica buscada.

En este trabajo nos proponemos simular por DM nanoestructuras C-Pd-H similares a esta. Se pretende calcular isotermas de absorción de H en nanoelectrodos para la detección de H.

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 [14]. En las placas y nanotubos de grafeno se extienden convenientemente las condiciones periódicas simulando planos y tubos 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 la nanobotella nos fueron suministradas por el Dr. Piotr Kowalczyk del Nanochemistry Research Institute, Curtin University Perth Australia y es nanohorn empleado en la referencia [15]. En este caso 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. Además se pretende generar otras morfologías para el nanocontenedor.

Se evalúa el stress atómico [16] 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) [17]. 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 (μ) 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) nanoestructuras C-Pd-H: Para simular por DM nanoestructuras C-Pd-H se debe disponer e implementar potenciales para los tres elementos y sus interacciones. Van Duin y colaboradores [18] desarrollan los potenciales ReaxFF (Reactive Force Field) que están específicamente diseñados para llevar adelante la DM de sistemas reactivos. El empleo de estos potenciales sin embargo implica un costo computacional extra. Van Duin en otro trabajo [19] emplea potenciales ReaxFF en el estudio por DM de la oxidación de metano sobre nanopartículas de Pd. En cambio Kowalczyk y colaboradores [5], emplean para la interacción C-C potenciales EDIP desarrollados por Marks, potenciales de Zou [17] para el Pd-H y un potencial de Morse de Chen y Lang basado en la teoría de la funcional densidad (DFT) para computar la energía potencial entre los átomos de C y Pd. Sin embargo este autor no hace DM y pone sólo un átomo de H en una nanopartícula de Pd dentro de un SWNH.

LAMMPS posee además una batería de comandos relacionados al manejo de los potenciales, permite mezclarlos entre sí, definirlos en zonas, etc. De esta manera sería posible también diseñar un conjunto de potenciales que considere la interacción C-Pd-H.

Resumiendo se analizarán las distintas posibilidades y se implementará el conjunto de potenciales que resulte más conveniente a nuestros intereses y posibilidades.

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] **"Hydrogen absorption of nanocrystalline palladium"**. Kuji T., Matsumura Y., Uchida H., Aizawa T., Journal of Alloys and Compounds. 330-332 (2002) 718-722.
- [5] **"Hydrogen and Pd-clusters"** Pundt A., Suleiman M., Bähz C, Reetz M. T., Kirchheim R., Jisrawi N.M. Materials Science Engineering B; 108(2004)19-23.
- [6] **"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.
- [7] **"Pressure composition isotherms for palladium hydride"**. Wolf R., Lee M.W. y Davis R.C., Phys. Rev. B (1993) 48(17): 12415-12418.
- [8] **"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.
- [9] **"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.
- [10] **"Atomistic Modeling of H absorption in Pd nanoparticles"**, Crespo E., Ruda M. y Ramos de Debiaggi S. Journal of Alloys and Compounds, On-line:
- [11] **"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.
- [12] **"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.

- [13] **"Hydrogen absorption in Pd thin-films"**. S. Ramos de Debiaggi, E.A. Crespo, F.U. Braschi, E.M. Bringa, M.L. AI?, M. Ruda. International Journal of Hydrogen Energy 39(2014) 8590-8595.
- [14] **"A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions"** Stuart S.J., Tutein J.A., Harrison A. J., Chem. Phys. 112(2000) 6472-6486.
- [15] **"Toward in silico modeling of palladium hydrogen-carbon nanohorns nanocomposites"**. Kowalczyk P., Phys.Chem.Chem.Phys.16 (2014) 11763.
- [16] **"Local stress calculation in simulations of multicomponent systems"**. Branicio P.S., Srolovitz D. J. J.Comput. Phys. (2009), 228:8467-79.
- [17] **"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.
- [18] **"A Reactive Force Field for Hydrocarbons"** Van Duin A. C., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W. A., J. Phys. Chem. A (2001) 105,9396-9409.
- [19] **"Investigation of methane oxidation by palladium - based catalyst via ReaxFF Molecular Dynamics simulation"**. Mao Q., Van Duin A. C. T., Luo K. H., Proceedings of Combustion Institute 36 (2017) 4339-4346.

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 permitirá que no estemos ajenos a estos avances científicos tecnológicos.

Contribuciones a la formación de Recursos Humanos

La ubicación geográfica de nuestra Facultad Regional en la ciudad de Plaza Huincul (Patagonia Argentina), hace que estemos un poco lejos de todo, y por ello los PIDs que puedan desarrollarse dentro de la Facultad resultan de vital importancia para la formación de recursos humanos.

El desarrollo de esta propuesta de Investigación dentro de la Facultad Regional Neuquén brindará un ámbito para la formación y/o perfeccionamiento para alumnos y docentes de la institución.

13. Cronograma de Actividades

Año	Actividad	Inicio	Duración	Fin
1	Revisión Bibliográfica	01/01/2019	12 meses	31/12/2019
1	Trabajar en objetivo (c)	01/01/2019	12 meses	31/12/2019
1	Trabajar en objetivos (a) y (b)	01/01/2019	12 meses	31/12/2019
1	Elaboración de trabajos y participación en Congresos y Reuniones Científicas	01/03/2019	9 meses	30/11/2019
2	Elaboración de trabajos y participación en Congresos y Reuniones Científicas.	01/01/2020	12 meses	31/12/2020
2	Revisión Bibliográfica	01/01/2020	6 meses	30/06/2020
2	Trabajar en objetivo (c)	01/01/2020	12 meses	31/12/2020

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
Modelado teórico computacional para la caracterización de propiedades físicas y químicas de moléculas, nanoestructuras, aleaciones e intermetálicos.	Ramos	Susana Beatriz	DIRECTOR	FAIN UNCo	Neuquén	Fortalecimiento de nuestro PID	Intercambio de software, conocimientos, datos, y toda otra colaboración posible.
Caracterización de propiedades físicas y químicas de moléculas, nanoestructuras metálicas, aleaciones e intermetálicos para tecnologías en desarrollo	Ramos	Susana Beatriz	DIRECTOR	FAIN UNCo	Neuquen	Fortalecimiento del PID	Intercambio de software, conocimientos, datos, y toda otra colaboración posible.

15. Presupuesto

Total Estimado del Proyecto: \$ 303000,00

15.1. Recursos Humanos - Inciso 1 e Inciso 5

Primer Año

Becarios Inciso 5	Cantidad	Pesos	Origen del financiamiento	
1. Becario Alumno Fac.Reg.	2	\$ 6000,00	UTN- SCTyP	UTN- SCTyP
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	1	\$ 15000,00
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	\$ 6000,00	\$ 15000,00	\$ 21000,00

Segundo Año

Becarios Inciso 5	Cantidad	Pesos	Origen del financiamiento	
1. Becario Alumno Fac.Reg.	2	\$ 6000,00	-	-
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	1	\$ 15000,00
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	\$ 6000,00	\$ 15000,00	\$ 21000,00

TOTAL GENERAL	Inciso 5	Inciso 1	Total General
Todo el Proyecto	\$ 12000,00	\$ 30000,00	\$ 42000,00

15.2 Bienes de consumo - Inciso 2

Año del Proyecto	Financiación Anual	Solicitado a
------------------	--------------------	--------------

1	\$ 25.000,00	Facultad Regional
2	\$ 25.000,00	Facultad Regional
Total en Bienes de Consumo		\$ 50.000,00

15.3 Servicios no personales - Inciso 3

Año	Descripción	Monto	Solicitado a
1	Pasajes y viáticos	\$ 20.000,00	Facultad Regional
1	Inscripción a congresos	\$ 10.000,00	Facultad Regional
1	Presentación de publicaciones	\$ 5.000,00	Facultad Regional
2	Pasajes y viáticos	\$ 20.000,00	Facultad Regional
2	Inscripción a congresos	\$ 10.000,00	Facultad Regional
Total en Servicios no personales			\$ 65.000,00

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	-	Impresora	a determinar	-	1,00	\$ 6.000,00	Facultad Regional
1	Necesario	-	PC ultima generacion con monitor	ultima generación	-	4,00	\$ 35.000,00	Facultad Regional
Total en Equipos							\$ 146.000,00	

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 Ciencia y Tecnica	Descarga libre	-	-	1,00	\$ 0,00	Organismos públicos nacionales (CONICET, Agencia, INTI, CONEA, etc.)
2	Disponible	Publicaciones del tema Biblioteca Ciencia y Tecnica	Descarga libre	-	-	1,00	\$ 0,00	Organismos públicos nacionales (CONICET, Agencia, INTI, CONEA, etc.)
Total en Bibliografía								\$ 0,00

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	de actualización permanente on line	software libre	4,00	\$ 0,00	Facultad Regional
1	Disponible	OVITO Open Visualization Tool	Visualizador 3D moléculas	de actualización permanente on line	software libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
1	Disponible	FORCE Fortran Project	Compilador Fortran	de actualización permanente on line	software libre	4,00	\$ 0,00	Organismos / Empresas Internacionales / Extranjeros
Total en Software							\$ 0,00	

16. Co-Financiamiento

Año	RR.HH.	Bienes de Consumo	Equipamiento	Servicios no personales	Bibliografía	Software	Total
1	\$21.000,00	\$25.000,00	\$146.000,00	\$35.000,00	\$0,00	\$0,00	\$227.000,00
2	\$21.000,00	\$25.000,00	\$0,00	\$30.000,00	\$0,00	\$0,00	\$76.000,00
Total del Proyecto	\$42.000,00	\$50.000,00	\$146.000,00	\$65.000,00	\$0,00	\$0,00	\$303.000,00

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
Total	\$ 0,00

Avales de aprobación, Financiamiento y Otros

	Orden	Nombre de archivo	Tamaño
Descargar	1	AvalesDinámicaMolecularenNanoestructuras.pdf	257959
Descargar	2	RESOLDINAMICAMOLECULARENNANOESTRUCTURAS.pdf	348476

Currículums (Currículums de los integrantes cargados en el sistema)