

CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

Informe Científico

Código de finalización: f209b101c9

PERÍODO

Desde: 2017 *Hasta:* 2018

1. DATOS PERSONALES.

Apellido/s: Evangelina Cinthia

Nombre/s: Cardillo

Correo electrónico:

Celular area: *Celular número:*

2. TEMA DE INVESTIGACIÓN.

Fisicoquímica de conductores iónicos. Electrolitos sólidos de interés en el campo de las energías "verdes"

Palabras Claves

Palabra 1: conductores iónicos *Palabra 2:* electrolitos sólidos *Palabra 3:* baterías de litio

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA.

Ingreso

Categoría: Asistente *Fecha:* 28/12/2016

Actual

Categoría: Asistente *Fecha:* 28/12/2016

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA.

Universidad Nacional del Sur - Departamento de Química - Av. Alem 1253 - Bahía Blanca

5. DIRECTOR DE TRABAJOS

Apellido/s: Marisa Alejandra

Nombre/s: Frechero

Título Universitario Superior: Doctor en Química

Firma del Director

Firma del Investigador

6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERÍODO.

- *Descripción para el repositorio institucional:*

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.

Descripción para el Repositorio Institucional: Durante este período se ha trabajado en la síntesis y caracterización de compuestos con matriz vítrea de composición basada en $(\text{Li}_2\text{O}/\text{B}_2\text{O}_3)$ y $(\text{Na}_2\text{O}/\text{B}_2\text{O}_3)$ modificados con MoO_3 , con el fin de encontrar la mejor matriz vítrea estable que contenga grandes cantidades de molibdeno, evaluar la influencia de las concentraciones de MoO_3 en la matriz y establecer su relación con el contenido de iones móviles en un vidrio de borato

Tareas desarrolladas en este período:

1. Síntesis por el método del quenching de los materiales objeto de estudio (compuestos con matriz vítrea de composición basada en $(\text{Li}_2\text{O}/\text{B}_2\text{O}_3)$ y $(\text{Na}_2\text{O}/\text{B}_2\text{O}_3)$ modificados con MoO_3). Se formuló el camino de síntesis apropiado para las composiciones vítreas diseñadas.
2. Caracterización de los materiales obtenidos por medio de Difracción de Rayos X (XRD) y Análisis Térmico Diferencial (DTA). Ambas con el objeto de evaluar la naturaleza vítrea de los materiales sintetizados y de obtener información específica fundamental como las correspondientes temperaturas de transición vítrea. Pudimos observar que la incorporación de MoO_3 a expensas del B_2O_3 no genera la formación de estructuras nuevas pero si afecta la naturaleza vítrea de los compuestos.
3. Las características estructurales fueron estudiadas por XRD, DTA, espectroscopia FTIR, espectroscopia Raman y medidas de densidad aplicando el principio de Arquímedes. Hemos confirmado que la matriz vítrea de estos sistemas se basa en unidades octaédricas MoO_6 y en unidades BO_3 y BO_4 . También pudimos explicar cómo la estabilidad de las matrices de borato que hospedan el molibdeno se ven afectadas por la presencia de iones móviles pequeños, y que el grado en que se ve afectada la estabilidad de la matriz depende no solo del ion móvil, sino también de la concentración en que se encuentra el ion en la matriz
4. Se realizaron las correspondientes medidas por Espectroscopia de Impedancia de los sistemas mencionados en función de la temperatura, en un rango de frecuencias de 20 Hz a 1 MHz. Análisis de los resultados de las medidas eléctricas y determinación de los circuitos equivalentes óptimos para su interpretación.
5. Colaboración en la caracterización de un material innovador desarrollado en nuestro grupo de investigación, que permite la transformación de la luz solar en energía calórica con alta eficiencia, consiguiendo además, cumplir un doble propósito: reaprovechar desechos industriales (parabrisas de automotores y cenizas) y contribuir al cuidado del medio ambiente mediante el desarrollo de un nuevo método de generación de "energía verde".

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

I. *Publicaciones:*

1)

Título: Captadores Solares

Autor/es: Mariela E. Sola; Soledad Terny; Pablo diPrátula; Evangelina Cardillo; Marisa Frechero

Revista: Avances en Ciencia e Ingeniería

Editorial: Executive Business School - La Serena - Chile

Referencias: Lugar: La Serena; Año: 2018; vol. 9 pag. 65-74

Resumen:

In this paper, we have designed an innovative material that allows the transformation of sunlight into heat energy with high efficiency and it fulfills a dual purpose: to reuse industrial wastes (motor vehicles? windshield and heat systems? ashes) and to contribute to environment care by developing of a new method of "green energy" generation. Nano-composites materials have been synthesized by Ag nano-particles anchored inside of a glassy matrix applying a solid state cell formed by crystalline and amorphous electrolytes. Our materials were characterized by UV-Vis and impedance spectroscopy which helped to clarify the improvements of their electrical properties (conductivity and permittivity) compared to the raw material (row glass windshield). The increase observed in their permittivity results in a significant improvement in the heat transport process (nanoparticle/glassy matrix) which provokes an improvement in the nano-composite material functionality for "energy harvesting" (sunlight). The collected energy is used to increase the temperature of the water that comes into contact with the composite system formed by the nano-particles in the recovered glassy matrix.

2)

Título: Unravelling the effects of polaron conduction on mixed conductivity glasses.

Autor/es: Marisa Frechero; Evangelina Cardillo; Pablo diPrátula; Soledad Terny; Luis Hernández García; Mariela E. Sola; Magali Molina

Revista: Polarons: recent progress and perspectives

Editorial: Nova Science Publishers

Referencia: Año 2018; p. 100-122

Resumen:

Oxide glasses are the oldest ever-known glasses. Probably, silicate glasses are the most ancient material of industrial interest. However, glasses formed by other kind of oxides are of uppermost importance because of the special properties which they are able to develop for many applications in electronics, optics, biology, etc. Every oxide that originates a three-dimensional network built by corner connected oxygen polyhedral, with a particular coordination number, conforms a glassy matrix of singular properties. Such properties can be modified by the incorporation of other oxides. In general, each oxide has a specific function, i.e. it could behave as a glass former, a former and a modifier or just a modifier. A huge number of glass compositions can be prepared by different methods which also have an influence on the glass properties. As we are particularly interested in the electrical

properties of glasses, in the present chapter, we analyze polaron conductivity in the presence of large ion concentrations, i.e. when the ionic conductivity is not negligible. We analyze the electrical response of uncommon oxide glasses like TeO_2 , P_2O_5 , B_2O_3 and Bi_2O_3 in which several transition metal oxides like V_2O_5 , Cu_2O , Ag_2O , Nb_2O_5 and MoO_3 have been incorporated in a single or mixed way when some modifier oxides are also present (Li_2O , Na_2O , BaO , MgO , SrO); the most important difference among them being that they are univalent or divalent cations. Towards the end of the second part of the last century, materials with low charge carrier mobility ($<0.1 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$) appeared posing a challenging problem because the classical transport theory was not able to explain such behavior. In 1959, Holstein proposed that an electron could be trapped and be not capable to move unless the lattices in where it is moved along with it; thus, introducing the polaron concept. That charge carrier (the electron, for example) induces a dipole moment on its surrounding and as a consequence, a new entity, the polaron, is born. Then, polaron conductivity results from the displacement of polarons in a material. During its transport, the polaron has to displace through the material. If the material is a glass, it has to displace through the glassy matrix, i.e. the charge carrier and the distortion in its surrounding. Therefore, we also analyze here, how the presence of large number of mobile cations affects the polaron transportation originated by the existence of transition metal oxides incorporated in non conventional oxide glasses.

3)

Título: Effect of small mobile cations on molybdenum borate glasses

Autor/es: Cardillo, Evangelina; Molina, Magali; Sola, Mariela; Terny, Soledad; diPrátula, Pablo; Frechero, Marisa

Revista: Material Science & Engineering International Journal

Editorial: MedCrave

Referencia: Lugar: Orchard Hilla Place; Año: 2018; Vol. 2 pag. 199-204

Resumen:

Lithium borate glasses modified with molybdenum oxide according to the formula: $x\text{MoO}_3(1-x)[0.25 \text{ Li}_2\text{O} \ 0.75 \ \text{B}_2\text{O}_3]$ prepared by the melt quenching technique were studied. Density, differential thermal analysis, FTIR and impedance spectroscopic were used to analyze these systems. It was confirmed that the glassy matrix of these systems was based on the MoO_6 octahedral units and on BO_3 and BO_4 units. The results explained how the stability of a borate matrix that hosted molybdenum ions was affected by the presence of small mobile ions (lithium ions in the present case). It was found that concentration of molybdenum oxide was restricted by strong interactions between the charged molybdenum structures and the mobile ions due to the presence of order forces that promote the formation of crystalline structures.

II. *Trabajos en prensa y/o aceptados para su publicación:*

III. *Trabajos enviados y aun no aceptados para su publicación:*

IV. *Trabajos terminados y aun no enviados para su publicación:*

V. *Comunicaciones:*

VI. *Informes y memorias técnicas.*

8. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

I. *Desarrollos tecnológicos:*

II. *Patentes o equivalentes:*

III. *Proyectos potencialmente transferibles, no concluidos y que estan en desarrollo:*

IV. *Otras actividades tecnológicas cuyos resultados no sean publicables:*

V. *Referencias:*

9. SERVICIOS TECNOLÓGICOS

10. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN

I. *Docencia:*

El contenido de Docencia se encuentra depositado en el repositorio institucional CIC-Digital: No

II. *Divulgación:*

El contenido de Divulgación se encuentra depositado en el repositorio institucional CIC-Digital: No

11. DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES.

12. DIRECCION DE TESIS.

13. PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS.

VII International Conference on Composite Materials - Bahia Blanca - 25 al 27 de Abril de 2018

- **"Síntesis y caracterización de materiales híbridos conductores de ion litio". S. Terny, E. Cardillo, P. diPrátula, M. Sola, M. Frechero. ORAL**
- **"Síntesis de materiales magneticos blandos para su aplicación en aerogeneradores". P. diPrátula, S. Terny, E. Cardillo, M. Sola, M. Frechero. POSTER**
- **"Nanocompositos vítreos transformadores de energía". M. Sola, P. diPrátula, E. Cardillo, S. Terny, E. Cardillo. POSTER**

103 Reunión de la Asociación Física Argentina - Buenos Aires - 17 al 21 de Septiembre de 2018

- **"Síntesis de materiales catódicos/magneticos blandos para su aplicación en baterías de litio y aerogeneradores". S. Terny, P. diPrátula, E. Cardillo, M. Sola, M. Frechero. POSTER**

14. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC.

15. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO.

Subsidio semi-automatico para investigadores - CIC Bs. As. - año 2018

Monto recibido: \$16000

El subsidio fue utilizado para solventar el pago de servicios tales como XRD, DSC, TG-DTA, FTIR, UV-Vis, etc., que tienen un costo que varía entre \$60 y \$500 por muestra, dependiendo de la técnica en cuestión.

También ha permitido la participación en distintos Congresos y Reuniones Científicas afines al tema de investigación:

* VII International Conference on Composite Materials

* 103 Reunión de la Asociación Física Argentina

16. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO

17. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO

18. ACTUACION EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCION O EJECUCION CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA.

19. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO.

* Ayudante de Docencia A con Dedicación Simple en la materia **Físicoquímica General** para la carrera de Bioquímica - Hasta Noviembre 2018 - 10 hs semanales de dedicación

* Ayudante de Docencia A con Dedicación Exclusiva en las materias **Físicoquímica General** para la carrera de Bioquímica y **Físicoquímica A** para la carrera de Licenciatura en Química - Desde Noviembre 2018 - 14 hs semanales de dedicación

20. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES.

21. TITULO, PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO.

MATERIALES APTOS PARA LA RETENCIÓN DEL MOLIBDENO PROVENIENTE DE DESECHOS NUCLEARES. CÓMO AUMENTAR SU ESTABILIDAD.

Siguiendo con la línea de investigación planteada en el plan de trabajo inicial, se pretende en este período finalizar con la caracterización de compuestos con matriz vítrea de composición basada en $[\text{Li}_2\text{O}/\text{B}_2\text{O}_3]$ y $[\text{Na}_2\text{O}/\text{B}_2\text{O}_3]$ modificados con MoO_3 , con el fin de encontrar la mejor matriz vítrea estable que contenga grandes cantidades de molibdeno, evaluar la influencia de las concentraciones de MoO_3 en la matriz y establecer su relación con el contenido de iones móviles en un vidrio de borato.

En el campo de las aplicaciones tecnológicas de los vidrios, es de fundamental importancia entender la influencia de la estructura en las propiedades de los vidrios, ya que es bien sabido en los vidrios de óxido, que el orden tridimensional de los componentes no es aleatorio.

El óxido de boro es un óxido formador básico de la matriz vítrea debido a su fuerza de unión elevada, menor tamaño de catión y bajo calor de fusión. Teniendo en cuenta que el óxido de boro fundido no cristaliza, incluso cuando se enfría a un ritmo lento, puede considerarse como uno de los mejores óxidos formadores de vidrio ya que genera redes con coordinación triple o cuádruple. Sin embargo, se ha visto que las características de la red vítrea dadas por este óxido dependen de su composición (es decir, de los óxidos formadores de vidrio y / o de los óxidos modificadores incorporados) y de las condiciones de fusión aplicadas

La literatura muestra muchos estudios sobre la estructura, las propiedades y los mecanismos de conducción de los vidrios formados/modificados por MoO_3 . Como el enlace Mo-O en MoO_3 es covalente, el ion de molibdeno generalmente aparece al menos en dos estados de oxidación: Mo^{+5} y Mo^{+6} en la matriz vítrea. Los estudios ESR sobre vidrios con iones de molibdeno han mostrado la presencia de iones coordinados octaédricamente junto con octaedros distorsionados que se aproximan a los tetraedros. Estos iones pueden funcionar como formadores de redes y también como modificadores de

red dependiendo de la composición química de la matriz vítrea y del óxido que actúa como anfitrión de la matriz. En un vidrio basado en B_2O_3 es probable que los iones Mo^{6+} se encuentren en la matriz vítrea como unidades tetraédricas de MoO_4^{2-} que se alternan con unidades tetraédricas de BO_4 .

Los iones de molibdeno incorporados en los vidrios son útiles debido a sus propiedades catalíticas. Por otro lado, entender cómo se comportan los iones de molibdeno en un vidrio es fundamental para aumentar su carga de desechos nucleares. Se ha estudiado previamente, que se produce un proceso de cristalización de molibdatos durante el enfriamiento en borosilicatos cuando la concentración de MoO_3 supera el 4% en peso

El molibdeno es un producto de fisión formado durante la producción de electricidad en un reactor nuclear. Por lo tanto, se mezcla un combustible nuclear con otros productos de fisión y actínidos en soluciones concentradas de residuos nucleares antes de confinarse en matrices vítreas de borosilicato de alta durabilidad.

Por otro lado, se pretende también incursionar en una nueva línea de investigación en la que el objetivo principal consiste en investigar las propiedades de luminiscencia y laser en vidrios de borato dopados con iones disprosio.

Se ha visto en la bibliografía que vidrios de borato de composición basada en $[Li_2O/B_2O_3]$ dopados con iones de tierras raras presentan aplicaciones en foto y termoluminiscencia. Se han desarrollado varios estudios con el fin de generar luz blanca utilizando Dy^{3+} , ya que debido a la intensidad de sus emisiones, los iones Dy^{3+} se pueden utilizar como centros luminiscentes para el crecimiento de luz blanca.

Condiciones de 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:
- I. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 21).
 - II. 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...'
 - III. Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico
1. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: carrera.investigador@cic.gba.gob.ar (puntos 1 al 22), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
 2. 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
1. Se deberá peticionar el informe en la modalidad on line, desde el sitio web de la CIC, sistema SIBIPA (ver instructivo página web).