

XVII Taller Regional de Física Estadística y  
Aplicaciones a la Materia Condensada

**TREFEMAC 2019**



**24 al 26 de abril de 2019**  
**San Luis - Argentina**

**Auspiciantes**



**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**  
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales  
Universidad Nacional de San Luis



Centro Científico Tecnológico San Luis

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas



Agencia Nacional de Promoción  
Científica y Tecnológica



Instituto de  
Física Aplicada

### 023 – Estudio mediante la simulación con el método de Monte Carlo de la interacción entre lisozima y una superficie cargada

**M.C. Franchetti<sup>1,2\*</sup>, P.M. Centres<sup>2</sup>, M.P. Ferraris<sup>3</sup>, M.E. Campderrós<sup>3</sup> y C.F. Narambuena<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Tecnológica Nacional. Facultad Regional San Rafael, Argentina.

<sup>2</sup> Instituto de Física Aplicada (INFAP). Universidad Nacional de San Luis – CONICET, Argentina.

Instituto de Investigaciones en Tecnología Química (INTEQUI). Universidad Nacional de San Luis-CONICET, Argentina

\* *claudinafranchetti@gmail.com*

La interacción proteína-superficie juega un papel clave en los campos de las ciencias biológicas y biomédicas, ya que tiene importantes aplicaciones tecnológicas en la purificación de proteínas y en el diseño de biosensores basados en proteínas. El equilibrio de las fuerzas de interacción controla el equilibrio de adsorción/desorción de la proteína sobre el sustrato.

Este trabajo estudia la adsorción de lisozima en un sustrato cargado utilizando la simulación de Monte Carlo. La proteína está representada por un modelo de grano grueso con componentes suficientes para reproducir el complejo comportamiento de la lisozima en sustratos cargados eléctricamente. Los resultados de la simulación en particular pueden mostrar cuando, tanto la proteína como el sustrato, están cargados positivamente.

Las contribuciones energéticas y entrópicas a la energía libre del proceso de adsorción son estimadas y analizadas. Los efectos del mecanismo de regulación de la carga, la localización de grupos titulables en la lisozima, así como la distribución de pequeños iones alrededor de la interfaz se estudian en detalle. Tanto la distribución asimétrica de los grupos cargados de la proteína como la distribución del contraión juegan un papel predominante en la adsorción de lisozima en un sustrato con el mismo signo de carga eléctrica.

### 024 – Anion-cation dynamic cooperation in a paradigmatic ionic conductor around its superionic transitio

**M.A. Frechero<sup>1\*</sup>, E. Vivas Tulandi<sup>2</sup>, y A. García<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> GFCIES. Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur. INQUISUR-CONICET- Argentina

<sup>2</sup> GICIS. Departamento de Física. Universidad de Cartagena. SUE - Caribe - Colombia

\* *frechero@uns.edu.ar*

Silver iodide (AgI) is one of the most extensively studied superionic conductors. In this work, we have applied the standard Buckingham pair potential and standard charge. For the first time, the microscopic dynamic events that allow the achievement of the superionic transition are revealed. A collaborative effect among cations and anions that makes possible the hopping mechanism within the appropriate timescale is revealed.

One of the most accepted explanations states that the  $\text{Ag}^+$  moves easily through the lattice, described as a molten sub-lattice of  $\text{Ag}^+$  ions, and that the high conductivity of  $\alpha$ -AgI is achieved owing to: a) the low charge cation and the large number of vacant sites available for the cations to move; b) the open framework; c) the low ion coordination which involves a low activation energy; and d) the polarizable anions that facilitate the displacement of cations. Though this explanation appears to be accurate the question of what removes those constraints on the dynamic of the silver cation allowing its ionic conductivity value to be incremented by several magnitude orders is still open. The present work is focused on applying the molecular dynamics formalism to reveal the structural features that cause this property change. The study of the movement of the silver iodide ions applying the Molecular Dynamics formalism, in terms of atom interactions through the most common pair potential Buckingham, allows us to reproduce the experimental behavior expected in its electrical conductivity.

Empirical models such as the Universal Dielectric Response and the Jump Relaxation Model describe the charge carrier behavior in a solid matrix without a microscopic description of the transport phenomenon. However, even the dynamic heterogeneity model interpretation could be useful to analyze the AgI dynamic, the evidence given in this work of different kind of mobile cations and its collaborative mechanism with the anions (iodide) allows us to confirm the importance of those distinguishable cations jumps that in the context of the Anderson-Stuart's activation energy calculation, a very traditional model applied to a solid ionic conductors, evidences the need for the iodide-silver mutual dynamic interaction.

The purpose of this work is to shed light on the current knowledge related to the transport phenomena and the relaxation phenomena in the paradigmatic solid ionic conductor, the AgI, from a very detailed microscopic point of view. We were able to evidence the *collaborative* movement between the cations and the anions which is responsible of the superionic transition when the phase transition occurs. We also showed not only the hopping mechanism involved but also its mechanism at the appropriate timescale.

## 025 – Modelo de fricción atómica aplicado a contactos microscópicos

**O.J.Furlong**<sup>\*</sup>, **S. Carrera**, **R. Belardinelli**, y **S.J.Manzi**

INFAP/CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Argentina Ejército de los Andes 950, 5700 San Luis, Argentina

<sup>\*</sup>*ojfurlong@unsl.edu.ar*

El fenómeno de fricción entre dos superficies sólidas ocurre a amplias escalas de tiempo y espacio, desde un contacto único a escalas nanométricas (e.j. microscopio de fuerza atómica), hasta contactos múltiples que llegan a grandes escalas macroscópicas, como es el caso del movimiento de placas tectónicas. A pesar de ser un fenómeno muy estudiado, aún no están claro los mecanismos de acción a escalas pequeñas [1]. El modelo más simple y utilizado en el análisis de un único contacto es el llamado modelo de Tomlinson [2,3]. Diferentes modelos han sido propuestos para describir el fenómeno de fricción a escala micro- y macroscópica, muchos de ellos basados en el efecto cooperativo de contactos individuales que interactúan entre si [4].

En este trabajo se presenta un modelo de un contacto microscópico (contactos múltiples) que evalúa el efecto cooperativo de contactos individuales, completamente independientes entre sí, basados en el modelo de contacto único de Tomlinson. Esta aproximación permite analizar efectos de la velocidad, temperatura y constantes elásticas sobre el comportamiento tribológico del sistema [5], al igual que efectos de la conmensurabilidad del contacto.

Referencias

1. Weber, B., Suhina, T., Junge, T., Pastewka, L., Brouwer, A.M., Bonn, D. "Molecular probes reveal deviations from Amontons' law in multi-asperity frictional contacts", *Nature Comm.*, 9, 888, 2018.
2. Tomlinson, G. "A molecular theory of friction", *Philos. Mag.*, 46, 905-939, 1929.
3. Manzi, S., Tysoe, W.T., Furlong, O. "Temperature Dependences in the Tomlinson/Prandtl Model for Atomic Sliding Friction", *Tribology Letters*, 55, 363, 2014.
4. Kim, H.J., Kim, D.E. "Nano-scale friction: A review", *Int. J. Precis. Eng. Manuf.*, 10(2), 141-151, 2009.
5. Furlong, O., Manzi, S., Martini, A. and Tysoe, W.T. "Influence of Potential Shape on Constant-Force Atomic-Scale Sliding Friction Models", *Tribology Letters*, 60:21, 2015.

## 026 – Simulación numérica de redes de vórtices en condensados escalares rotantes

**C. R. Ghezzi**<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Física, Universidad Nacional de La Pampa, Santa Rosa, La Pampa, Argentina*

<sup>\*</sup>*gluon00@yahoo.com*