

## ***Entre dos aguas: un nuevo vidrio del agua inducido por fuerzas mecánicas.***

**Dra. Valeria Molinero**

*Department of Chemistry, The University of Utah, EEUU*

- **Lunes 15 de septiembre a las 13 hs.**
- **Aula RFP 3er piso DQIAQF/INQUIMAE**

### Resumen

El agua puede comportarse como dos líquidos distintos y, a la vez, como dos vidrios bien diferenciados: low-density amorphous ice (LDA), con una densidad similar al hielo, y high-density amorphous ice (HDA), con una densidad ~25% más alta. El reciente descubrimiento de un hielo amorfo de densidad intermedia (MDA), observado en el proceso de molienda en bolas (ball milling) de hielo a bajas temperaturas, sorprendió porque su densidad y propiedades quedan entre esos extremos, planteando dudas sobre su origen y su lugar en el ya intrincado diagrama de fases del agua. En este seminario mostraré nuestro reciente estudio mediante simulaciones moleculares, que muestra que MDA puede entenderse como un estado amorfo sostenido por fuerzas mecánicas — una fase amorfa inducida por cizallamiento (shear-driven amorphous, SDA)— y que puede generarse a partir de hielo cristalino o de las otras formas amorfas mediante cizallamiento (shearing) controlado. Mostraré que la tasa de cizallamiento  $\dot{\gamma}$  se comporta como una nueva variable fuera del equilibrio que permite obtener vidrios con densidades desde  $0.94 \text{ g/cm}^3$  hasta  $1.25 \text{ g/cm}^3$  y acceder a estados amorfos inaccesibles sólo con temperatura y presión, ampliando así el mapa de fases del agua. Nuestro estudio muestra que aplicar fuerzas mecánicas (por ejemplo, molienda en bolas o cizallamiento controlado) no solo «rompe» estructuras, sino que abre una vía controlable para diseñar vidrios y fases novedosas en el agua y en otros materiales con coordinación tetraédrica, con implicancias para la síntesis y para la termodinámica fuera del equilibrio.