

Estudio mediante primeros principios del diagrama esfuerzo-deformación de nanoalambres de Al-Si

Content

El estudio de las propiedades mecánicas de materiales cristalinos a nivel nanométrico muestra una fuerte dependencia de estas propiedades con el tamaño del material. Por ejemplo, se ha observado que el módulo de Young del ZnO aumenta al reducirse las dimensiones de sus alambres nanométricos, mientras que materiales como el grafeno tienen un módulo comparable al del diamante. Los nanotubos de carbono también destacan por su resistencia a la tensión, que supera en 100 veces la del acero.

Dado el alto costo y complejidad de las mediciones experimentales a esta escala, se emplean técnicas de modelado computacional como la Dinámica Molecular (DM). Esta técnica resuelve las ecuaciones de movimiento para cada átomo del sistema utilizando la segunda ley de Newton y modela las fuerzas a través de potenciales simplificados, permitiendo predecir propiedades en diferentes condiciones termodinámicas.

El planteamiento del problema busca predecir la máxima resistencia mecánica de nanoalambres de aluminio (Al) dopados con silicio (Si) mediante el cálculo de diagramas esfuerzo-deformación utilizando DM.

La justificación destaca que los nanoalambres metálicos presentan reorientaciones estructurales únicas, no observadas en materiales macroscópicos, debido a la alta tensión superficial característica de la escala nanométrica. Este fenómeno los convierte en un tema de gran interés en ciencia de materiales.

Tipo de presentación

Póster

Primary author(s) : Ms. GARCIA JAUREGUI, Jimena (UAEM)

Co-author(s) : Dr. RODRIGUEZ VALDEZ, Socorro (UNAM)

Presenter(s) : Ms. GARCIA JAUREGUI, Jimena (UAEM)