

Simulación de materiales a la escala nano.

Simulation of materials at the nanoscale.

Director: BRINGA, Eduardo

Correo Electrónico: ebringa@yahoo.com

Co-Director: -

Integrantes: MILLAN KUJTIUK, Emmanuel; URBASSEK, Herbert; RUESTES, Carlos Javier; BERTOLDI, Dalia Surena; FIORETTI, Fabricio; TRAMONTINA, Diego; ERQUIAGA, María José; RIM, Estefanía.

Palabras Clave: simulaciones, dinámica molecular, nanotecnología

Resumen Técnico: Las propiedades a la escala nano de los materiales pueden tener una gran influencia en su comportamiento macroscópico. Por ejemplo, las propiedades mecánicas están parcialmente determinadas por la generación y acumulación de defectos en la escala nano, como dislocaciones, precipitados, porosidad e interfaces. Además, si el material realmente consiste de nanoestructuras, como por ejemplo un conjunto de nanopartículas, puede mostrar propiedades mecánicas y termodinámicas extraordinarias, de interés para aplicaciones tecnológicas. Simularemos varios tipos de nanosistemas utilizando dinámica molecular (molecular dynamics, MD), incluyendo defectos puntuales, de línea, de superficie y volumétricos. Se estudiará la deformación mecánica de nanosistemas bajo distintas condiciones de contorno y a distintas velocidades de deformación, como así también la respuesta de nanosistemas a condiciones extremas en general, incluyendo radiación. Estos estudios permitirá la formación de recursos humanos de grado y posgrado con conocimientos avanzados en nanociencia, una área nueva para la U.N. Cuyo que es crucial dentro del marco de la estrategia nacional para el avance de la ciencia y la tecnología, y al mismo tiempo desarrollará colaboraciones con investigadores del área en el país y en el exterior.

Keywords: simulation, molecular dynamics, nanotechnology

Summary: Properties of materials at the nanoscale greatly influence their macroscopic behavior. For instance, mechanical properties are partly determined by the generation and accumulation of nano-scale defects like dislocations, precipitates, porosity, and interfaces. In addition, if the material is truly a nanostructure, like a collection of nanoclusters, it can display extraordinary mechanical and thermodynamic properties, of interest to technological applications. We will model a variety of nano systems using molecular dynamics (MD) atomistic simulations, including point, line, surface and volume defects. We will study mechanical deformation of nanosystems with different boundary conditions and deformation rates, as well as the response of nanosystems to extreme conditions in general, including radiation damage. This will allow the formation of undergraduate and graduate human resources savvy in nanoscience, a new area for the U.N. Cuyo which is crucial in the national



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



ICB
INSTITUTO DE CIENCIAS BÁSICAS
Naturaleza - Ciencia - Humanismo

► **2013**
AÑO DEL BICENTENARIO DE LA
ASAMBLEA GENERAL CONSTITUYENTE
DE 1813

strategy for the advancement of science and technology, at the same time developing collaborations with national and foreign researchers in the area.