

Modelamiento y propiedades mecánicas de nanohilos bimetálicos

Pierre Cocco-Magnard², Javier Rojas-Nunez^{1,2*}, Felipe J. Valencia^{2,3},
Eduardo M. Bringa⁴, Samuel E. Baltazar^{1,2}

¹Departamento de Física, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile.

²CE DENNA, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile.

³Departamento de Computación e Industrias, Facultad de Ciencias de la Ingeniería,
Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

⁴CONICET & Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza, Mendoza 5500, Argentina.

*javier.rojasn@usach.cl

Los materiales bimetálicos poseen propiedades que se diferencian de sus contrapartes puras, lo cual permite su uso en nuevas aplicaciones. En la actualidad, y gracias al uso de la nanotecnología, se están explorando diversas configuraciones de nanoestructuras, llegando a utilizar en aplicaciones como catálisis y sensado. En particular, los nanohilos, son estructuras que pueden ser moduladas experimentalmente en grosor y composición, lo cual las hace versátiles para diversas aplicaciones. Es por esto que, mediante el uso de simulaciones de dinámica molecular, se calculan las propiedades mecánicas de nanohilos bimetálicos policristalinos de Fe y Ni para distintas concentraciones con un mismo grosor.

Las simulaciones son llevadas mediante dinámica molecular con el software LAMMPS y un potencial estilo embedded atom ajustado por Bonny et al. [1] Los hilos consisten de estructuras policristalinas formadas por cilindros concéntricos de material, manteniendo un diámetro externo de 12 nm. Estas estructuras fueron sometidas a simulaciones de tensión y compresión a una tasa de 0.1 ns^{-1} .

Los resultados mostraron cambios en la respuesta mecánica de las estructuras con respecto a la concentración elemental de las mismas. Se encontró que esta respuesta mecánica presenta una variación mayormente lineal del módulo de Young con respecto a la concentración, además se realizaron análisis más detallados sobre el comportamiento de los granos durante el proceso de deformación. Estos resultados permiten una mejor comprensión de los cambios esperados sobre estos nanohilos, permitiendo un mejor diseño de las estructuras en futuros trabajos.

Agradecimientos: Los autores agradecen al NLHPC por los recursos computacionales que hicieron parcialmente posible el estudio. Además, JRN y SB agradecen al proyecto DICYT 042231BR_Postdoc, y el Fondo basal para centros científicos y tecnológicos proyecto AFB180001.

Referencias

[1] G. Bonny, R. C. Pasianot, and L. Malerba, *Philosophical Magazine* 89, 3451 (2009)