



Contribution ID : 161

Type : Poster

Efecto del tamaño y la composición sobre las propiedades estructurales y térmicas de las nanoaleaciones binarias Cu-Ni

El presente trabajo tiene como propósito determinar y analizar las propiedades estructurales y térmicas de las NAs Cu_{100-x}Ni_{x} mediante el método de DM usando potenciales de tipo EAM. Con la finalidad de estudiar el efecto del tamaño y la composición de las NAs binarias, se ha considerado los siguientes modelos, tanto para elementos puros de Cu y Ni, como a su vez variando la composición “x” desde 10% hasta 90% con paso de 10% y para dos tamaños de 561 y 923 átomos, los cuales inicialmente se distribuyen aleatoriamente en una red cristalina FCC. En el proceso de simulación se usa el software LAMMPS, considerando etapa inicial de equilibración y calentamiento, seguida de proceso de relajación y enfriamiento a una tasa de 0.2 K/ps. El análisis estructural y visualización de las configuraciones atómicas se llevaron a cabo con OVITO. Resultados preliminares de la energía potencial en función de la temperatura evidencian comportamiento característico de una transición de fase de primer orden, acompañado de histéresis térmica entre los procesos de calentamiento y enfriamiento. También, se observa un desplazamiento en las temperaturas de transición al comparar nanopartículas de 561 y 923 átomos, lo que pone de manifiesto un claro efecto de tamaño.

Primary author(s) : Mr VILCA SUCASAIRE, Franklin Paúl (UNMSM)

Co-author(s) : ROJAS, Justo (Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Fisicas); Dr ROJAS AYALA, Chachi (UNMSM); CUBA SUPANTA, Gustavo (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Presenter(s) : Mr VILCA SUCASAIRE, Franklin Paúl (UNMSM)

Session Classification : Poster Fisica del Estado Solido