



Proyectos de la Secretaría de Investigación, Internacionales y Posgrado

Convocatoria: PROYECTO SIIP TIPO 1 BIENAL 2019
Título: Simulaciones a la nanoescala de materiales con defectos

Director: BRINGA, EDUARDO
Codirector: PLANES, MARIA BELEN
Área: INGENIERIA-DE MATERIALES

Resumen de Proyecto:

Las propiedades a la nanoescala tienen una influencia significativa en el comportamiento de los materiales a la macroescala. Las propiedades mecánicas, por ejemplo, están parcialmente determinadas por la generación y acumulación de defectos a la nanoescala como dislocaciones, precipitados, porosidad e interfaces. Para este proyecto en particular, esperamos mejorar materiales utilizando simulaciones, principalmente dinámica molecular clásica (Molecular dynamics, MD), para obtener la respuesta mecánica de varios tipos de nanosistemas con defectos, incluyendo modificaciones debidas a irradiación. Se estudiarán distintos nanomateriales, incluyendo materiales basados en carbono (grafeno, carbono amorfo, etc.), óxidos (sílica y óxidos metálicos), y nanomateriales metálicos como nanoalambres y nanopartículas), para poder desarrollar modelos de cómo los defectos afectan las propiedades mecánicas en el régimen elástico y el régimen plástico. Se van a considerar materiales con defectos pre-existentes, incluyendo defectos producidos por irradiación, que puedan cambiar las propiedades mecánicas. Esto requiere la simulación del proceso de irradiación, considerando irradiación por láser y por iones, e incluyendo a bombardeo con nanopartículas. Para cada uno de los materiales de interés se va a simular el proceso de deformación. Resultados experimentales de nuestros colaboradores internacionales van a contribuir a verificar la validez de nuestras simulaciones y proveer una guía para probar nuevos escenarios. Estos estudios van a reforzar la investigación a nivel local y nacional, contribuyendo a la formación de recursos humanos en el área de nanociencia a nivel de grado y posgrado.

Palabras Claves : 1- SIMULACIONES 2- DEFECTOS 3- MECANICA



Titulo (Inglés): Nanoscale simulations of materials with defects

Resumen de Proyecto (inglés):

Nanoscale properties might have a significant influence in the behavior of materials at the macroscale. For instance, mechanical properties are partially determined by the generation and accumulation of nanoscale defects, such as dislocations, precipitates, porosity and interfaces. For this particular project, we are aiming to improve materials using simulations, mostly classical molecular dynamics (MD) simulations, to obtain the mechanical response of several types of nanosystems with defects, including modifications due to irradiation. We will study several different nanomaterials, including carbon-based materials (graphene, amorphous carbon, etc.), oxides (silica and metallic oxides), and metallic nanomaterials (nanowires, nanoclusters, etc.), in order to develop models of how defects affect mechanical properties (elastic and plastic behavior). We will consider materials with pre-existing defects, including irradiation-induced defects which can change mechanical properties. This will in turn require modeling the irradiation stage, considering laser and ion bombardment, including cluster bombardment. For each of the materials of interest we will carry mechanical load simulations. Experimental results from our international collaborators will validate simulations and provide guidance for testing of novel scenarios. These studies will strengthen local and national research, helping the formation of graduate and postgraduate human resources in the area of nanoscience.

Palabras Claves : 1- SIMULATIONS 2- DEFECTS 3- MECHANICAL



EQUIPO DE TRABAJO

BRINGA, EDUARDO

ebringa@yahoo.com	Director
FACULTAD DE INGENIERIA	

DOS SANTOS, GONZALO

gonzalodossantos@gmail.com	Becario de Posgrado
FACULTAD DE INGENIERIA	

VISAGUIRRE, HUGO ALEJANDRO

hvisaguirre@gmail.com	Estudiante de Grado
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES	

CARDIN, BRUNO

brunocardin.27.97.riverplate@gmail.com	Estudiante de Grado
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO	

DELUIGI, ORLANDO RAUL

ordws@hotmail.com	Becario de Posgrado
FACULTAD DE INGENIERIA	

MORA BARZAGA, GERAUDYS

gmorabarzaga92@gmail.com	Becario de Posgrado
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES	

APARICIO, EMILIANO

emilianojaparicio@gmail.com	Tesista de Posgrado
FACULTAD DE INGENIERIA	

PEREZ DIAZ, MIGUEL ALFREDO

miguelpdiaz01@gmail.com	Becario de Posgrado
DEPARTAMENTO DE SIMULACIONES EN MATERIALES, ASTROFISICA Y FISICA	

TRAMONTINA, DIEGO RAMIRO

diego.tramontina@conicet.gov.ar	Investigador
UNIVERSIDAD DE MENDOZA	

GARCÍA VIDABLE, GONZALO NAHUEL

gonzalongv91@gmail.com	Tesista de Posgrado
DEPARTAMENTO DE MATEMATICAS	

PLANES, MARIA BELEN

belenplanes.88@gmail.com	Codirector
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES	



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO

SIIP
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN,
INTERNACIONALES Y POSGRADO

Este objeto está alojado en la Biblioteca Digital en la URL: siip2019-2021.bdigital.uncu.edu.ar .

Se ha aportado el día 16/06/2020 a partir de la exportación de la plataforma SIGEVA de los proyectos bianuales de la SIIP 2019-2021