



Universidad Nacional Mayor de San Marcos

XXIV Simposio Peruano de Física

2 al 6 Noviembre 2015

Transición de Fase en Nanoaleaciones de Hierro-Aluminio con Estructura Core-Shell: Estudio con Dinámica Molecular

Shigueru Nagata, Zhenia Davalos, Justo Rojas

Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú

Introducción

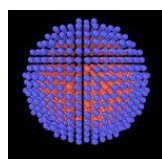
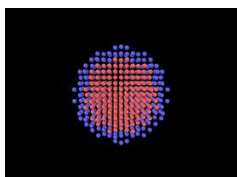
Los procesos de fusión y solidificación de las nanopartículas de elementos puros y nanoaleaciones en la actualidad siguen atrayendo interés por sus propiedades especiales y posibles aplicaciones en diversos campos como catálisis, electrónica, óptica y hasta remediación ambiental.

Objetivos

- Determinar el rango de temperatura donde ocurre la fusión de la nanoaleación Fe-Al.
- Determinar si el tamaño de la nanoaleación influye en la temperatura de fusión.

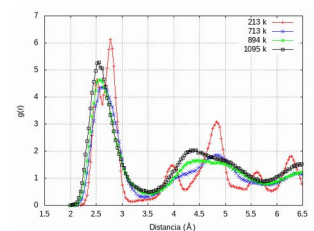
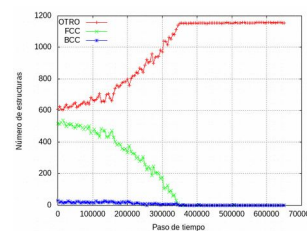
Procedimiento

Se utiliza la simulación con el método de dinámica molecular para estudiar los procesos de fusión y solidificación de las nanopartículas de Al@Fe en concentración de N-m para el aluminio y m para el hierro (siendo N el número total de átomos y m el número de átomos de Fe) con estructura core-shell. Es decir los átomos de Al en el centro y en la capa externa los átomos de Fe. Se han simulado varias concentraciones con velocidades de calentamiento de 2 K/ps y 10 K/ps en el rango de temperatura de 200 K a 1600 K. La simulación se realizó con el software LAMMPS con potencial de interacción tipo EAM.

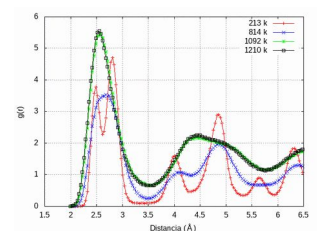
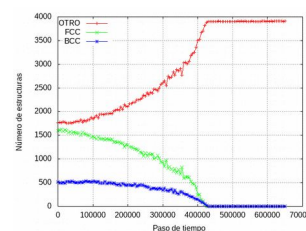


Estructura interna y externa de la nanopartícula de 1157 átomos a 200 K. Red de tipo FCC con parámetro de red 4.04 Anstron.

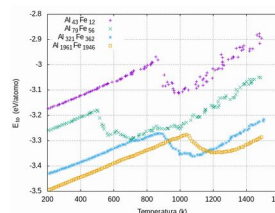
Resultados



Nanoaleación de 1157 átomos



Nanoaleación de 3907 átomos



Energía total vs Temperatura para varias concentraciones. Con un calentamiento de 2K/ps

Conclusiones

- La transición de fase en la nanoaleación de 1157 átomos ocurre aproximadamente a 900 K.
- La transición de fase en la nanoaleación de 3907 átomos ocurre aproximadamente a 1000 K.
- El número de estructuras de tipo FCC decrece.
- Ambas nanoaleaciones muestran cierto grado de cristalinidad a 213 K aproximadamente.