# Docencia de la Física en la nanoescala: visualización de resultados de simulación molecular de nanomateriales


**Serrano-López, R. [1]; Yeguas, V.; Romero-Santacreu, L. y Cuesta-López, S. [2]**

**GID de la UBU INNOLAB**

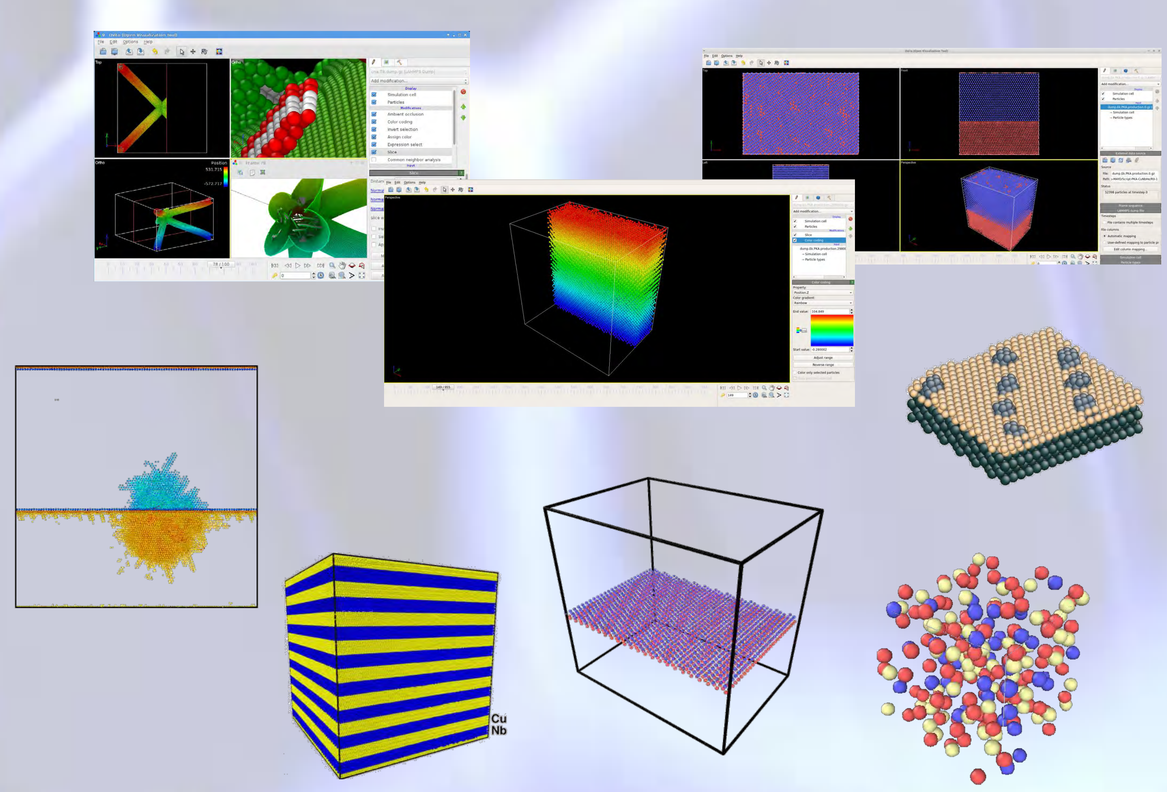
[1] Escuela Politécnica Superior Universidad de Burgos, robertosl@ubu.es

[2] ICCRAM, International Research Center in Critical Raw Materials for Advanced Industrial Technologies, scuesta@ubu.es

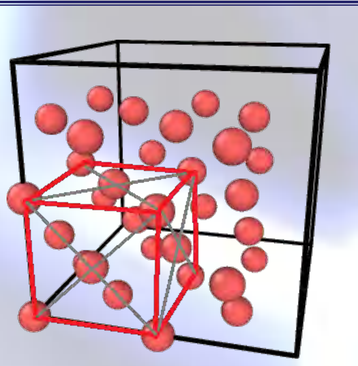

Las técnicas de simulación utilizadas en la investigación de materiales en la nanoescala, permiten disponer de **herramientas muy útiles** para explicar a los alumnos, por ejemplo, ciertas estructuras o configuraciones especiales, transmitir algunos conceptos que explican sus propiedades mecánicas y capacidad de deformación, su respuesta frente a fuerzas externas, o las bases físicas que justifican el comportamiento a de los mismos a escala macroscópica.

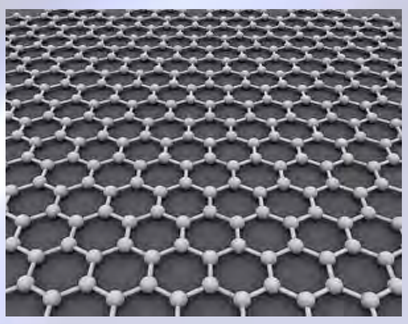
De igual manera, estos mismos códigos permiten simular algunos de los ensayos que se efectúan realmente a los propios materiales, anticipando sus resultados y permitiendo estimar incluso el valor de alguno de los parámetros que rigen sus propiedades.

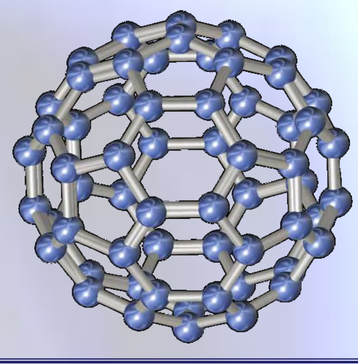
Los programas de visualización han evolucionado en los últimos años, permitiendo en la actualidad representar los resultados de manera totalmente gráfica y **tridimensional**, permitiendo contemplar la realidad física simulada desde cualquier ángulo. La salida puede realizarse de forma **interactiva**, con imágenes estáticas de ciertos momentos, o en forma de video, que permite comprobar los efectos en el tiempo.




## SISTEMAS CRISTALINOS, CONFIGURACIONES ESPECIALES, NANOESTRUCTURAS



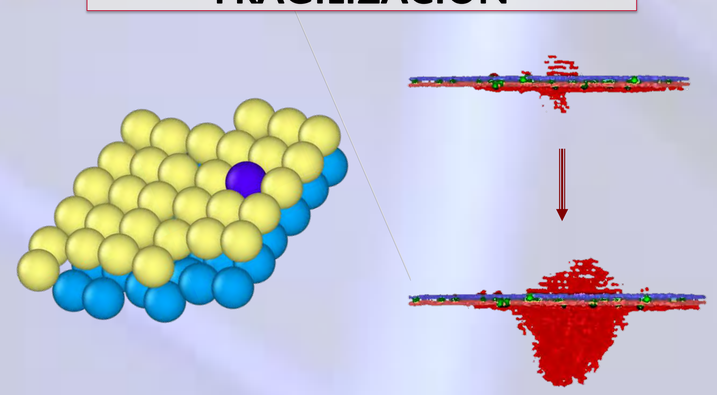


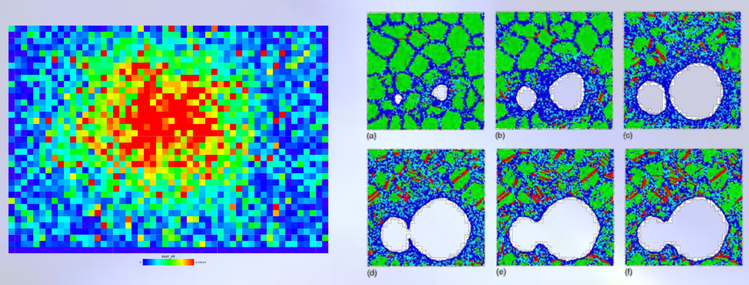


## DEFECTOS PUNTUALES EN CRISTALES

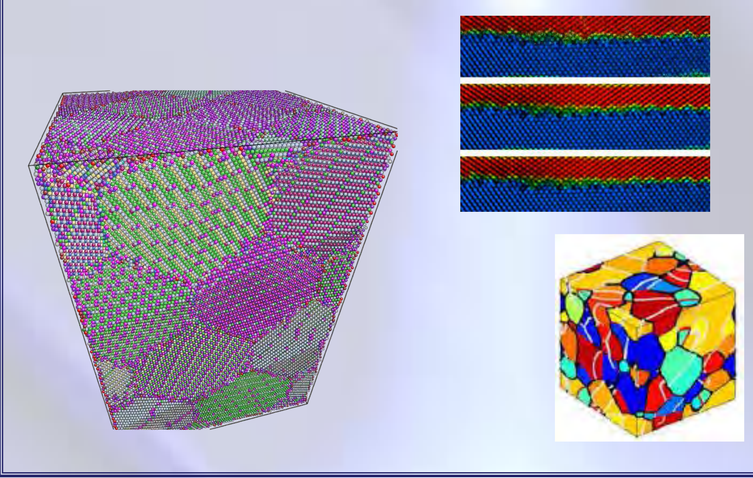
## CASCADAS DE DEFECTOS

## NUCLEACIÓN DE HUECOS Y FRAGILIZACIÓN

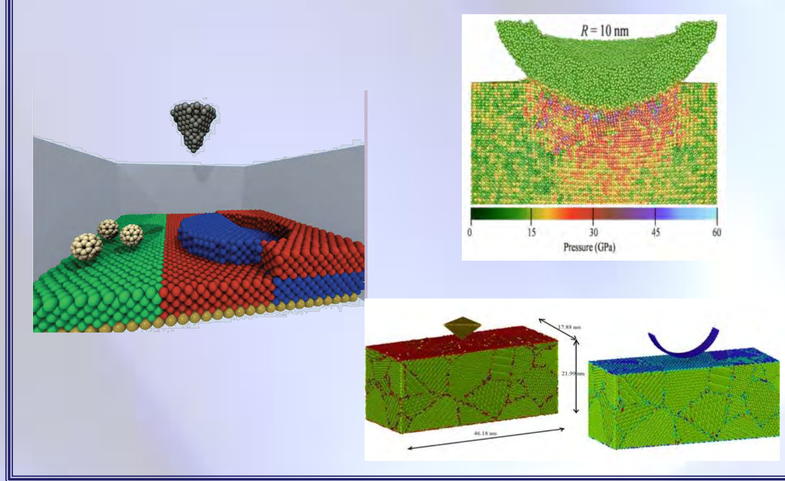


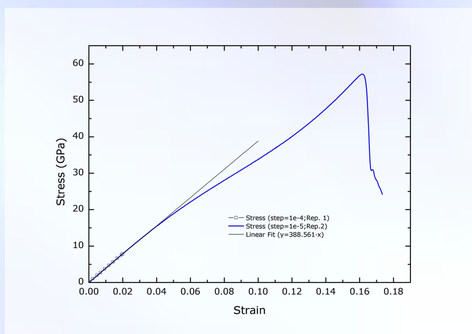
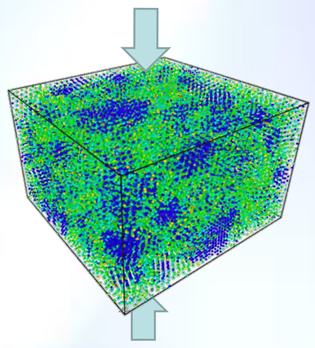


## BORDES DE GRANO



## NANOINDENTACIÓN




## TENSIÓN y DEFORMACIÓN