

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA “Ing. Luis Rivera Terrazas”



SEMINARIO SEMANAL

“Jesús Reyes Corona”

Algoritmos evolutivos aplicados para minimizar el transporte térmico en nanocintas atómicas”

J. E. González¹ y G. B. Díaz-Cortés²

¹Departamento de Física, Facultad de Ciencias, UNAM, ²Instituto Mexicano del Petróleo

Resumen: En el contexto de las energías renovables, el desarrollo de materiales con propiedades específicas es fundamental para diseñar dispositivos de alto rendimiento. En particular, en el área de la termoelectricidad, se requiere un material con baja conductividad térmica para optimizar la figura de mérito termoeléctrica adimensional, lo que incrementa la eficiencia del efecto Seebeck. En este estudio, realizamos una investigación atómica de las propiedades de transporte térmico en nanocintas con estructura de sal de roca, las cuales están conectadas en sus extremos a dos reservorios semi-infinitos. Para analizar el transporte térmico a escala atómica, utilizamos el potencial interatómico de Born junto con la fórmula térmica de Kubo-Greenwood, basada en técnicas de funciones de Green. Esta metodología requiere un conjunto de parámetros atómicos específicos para caracterizar el transporte térmico. Para determinar los mejores parámetros, empleamos algoritmos evolutivos con el objetivo de minimizar la conductividad térmica. Estos algoritmos son altamente eficaces para esta tarea, ya que permiten explorar de manera eficiente espacios de búsqueda grandes y complejos, enfocándose en regiones donde se encuentran los mínimos locales. Este proceso facilita la identificación de un conjunto óptimo de soluciones. En general, nuestro enfoque ofrece una estrategia integral y efectiva para el diseño de materiales con baja conductividad térmica, contribuyendo al avance en la optimización de dispositivos termoeléctricos.

Auditorio del Instituto

Viernes 26 de septiembre de 2025

13:00 hrs