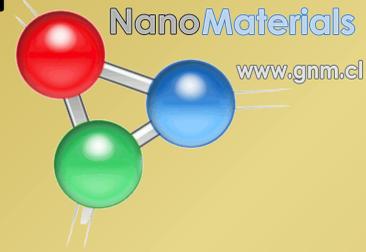


PROPIEDADES MECÁNICAS DEL COBRE: SIMULACIÓN COMPUTACIONAL A NIVEL ATÓMICO

N. Amigo¹, G. Gutiérrez¹

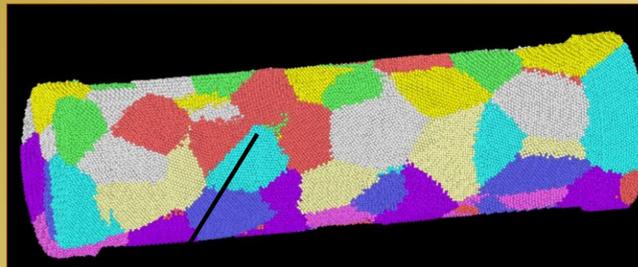
¹Grupo de NanoMateriales, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile
nicorafa@gmail.com, www.gnm.cl



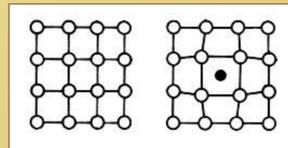
Resumen

Se presentan estudios de propiedades mecánicas de cobre poli-cristalino con y sin impurezas de plata, mediante simulaciones de dinámica molecular utilizando el software LAMMPS [1] y potenciales interatómicos de átomos embebidos [2]. El primer sistema consiste en aproximadamente 500 mil átomos de cobre y 125 granos. El segundo sistema posee características idénticas sumado a impurezas intersticiales de plata en bordes de grano con concentración 1.64%. Se realiza el ensayo de esfuerzo-deformación en ambos casos y se determinan los regímenes elástico, plástico y fractura del material. Resultados indican un aumento de rigidez, resistencia y pérdida de ductilidad del material debido a las impurezas de plata, respecto al caso de cobre puro.

Sistemas estudiados



Distinta orientación de estructura cristalina entre granos



Sistema 1

- Cu poli-cristalino cilíndrico
- 125 granos
- 500 mil átomos aprox.
- Largo 470 [Å], radio 65 [Å]

Sistema 2

- Mismas características del sistema 1
- Impurezas intersticiales de Ag, a 1.64% de concentración (c/r al total del número de átomos)

Representación de defecto intersticial

Ensayos de esfuerzo-deformación mediante dinámica molecular

Metodología

- 1) Fuerza interatómica dada por potencial de átomos embebidos [2]
- 2) Minimización de energía potencial del sistema
- 3) Re-escalado de las posiciones de los átomos a lo largo del cilindro, un 0.05% respecto a la longitud inicial
- 4) Cálculo del stress y deformación del sistema
- 5) Se repiten pasos 2) a 4)

Esquema de re-escalado de posiciones



Resultados obtenidos

1. Esquema visual del ensayo

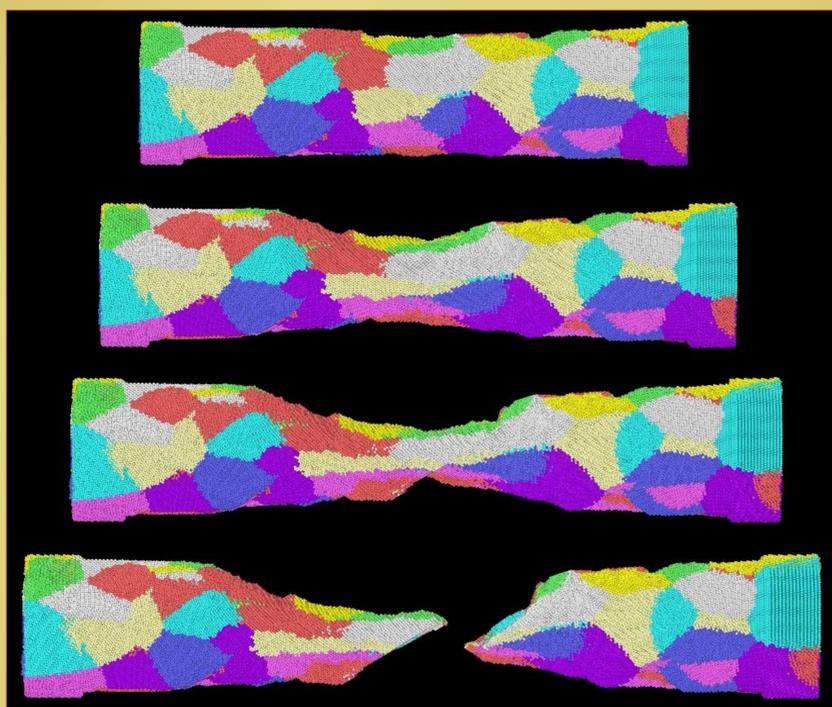
Los ensayos de esfuerzo-deformación obtenidos son visualmente iguales entre si. Por ello, se presentan imágenes del ensayo sólo para el sistema Cu puro.

Deformación 11%

Deformación 29%

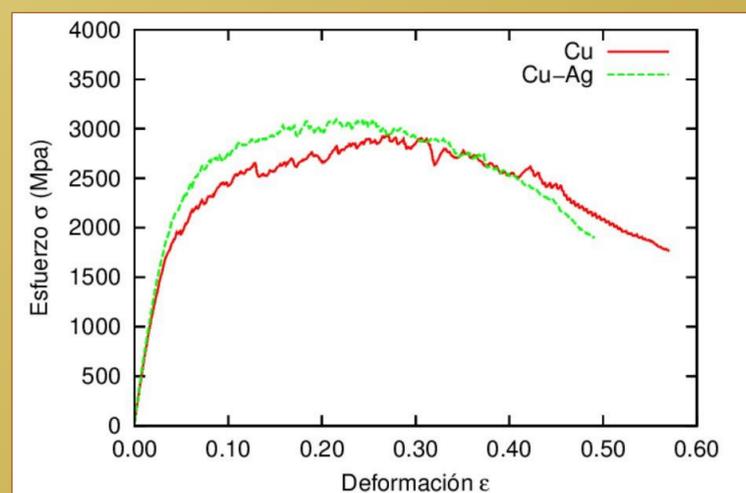
Deformación 44%

Fractura



2. Curvas de esfuerzo-deformación

En el gráfico se observan las curvas de esfuerzo-deformación de ambos sistemas. En la tabla se muestra el módulo de Young E, el límite elástico σ_{elas} , la resistencia máxima a la tensión σ_{ult} , el esfuerzo de fractura σ_f como también la deformación de fractura ϵ_f de cada curva.



Composición	E [GPa]	σ_{elas} [MPa]	σ_{ult} [MPa]	σ_f [MPa]	ϵ_f
Cu	62.4	1292.7	2924.3	1740.3	0.57
Cu-Ag	67.4	1464.9	3081.4	1876.5	0.49

3. Conclusiones

- La rigidez del cobre poli-cristalino aumenta al incluir impurezas intersticiales de plata en los bordes de grano.
- La resistencia máxima a la tracción también se ve aumentada.
- Impurezas de plata intersticiales en bordes de grano del cobre provocan una pérdida de ductilidad de éste.

Agradecimientos

Los autores agradecen apoyo Beca Conicyt (N. Amigo), Codelco IM-2 y discusiones científicas con Prof. Miguel Ignat.

Referencias

- [1] Plimpton S., J. of Comp. Phys. 117, 1 (1995).
- [2] Daw M., Baskes M., Phys. Rev. B 29, 12, 6443 (1984)