



Propiedades mecánicas de materiales: cobre, vidrios metálicos y daño por radiación

Gonzalo Gutiérrez,

Grupo de NanoMateriales,

Departamento de Física, Facultad de Ciencias,

Universidad de Chile

gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl

www.gnm.cl

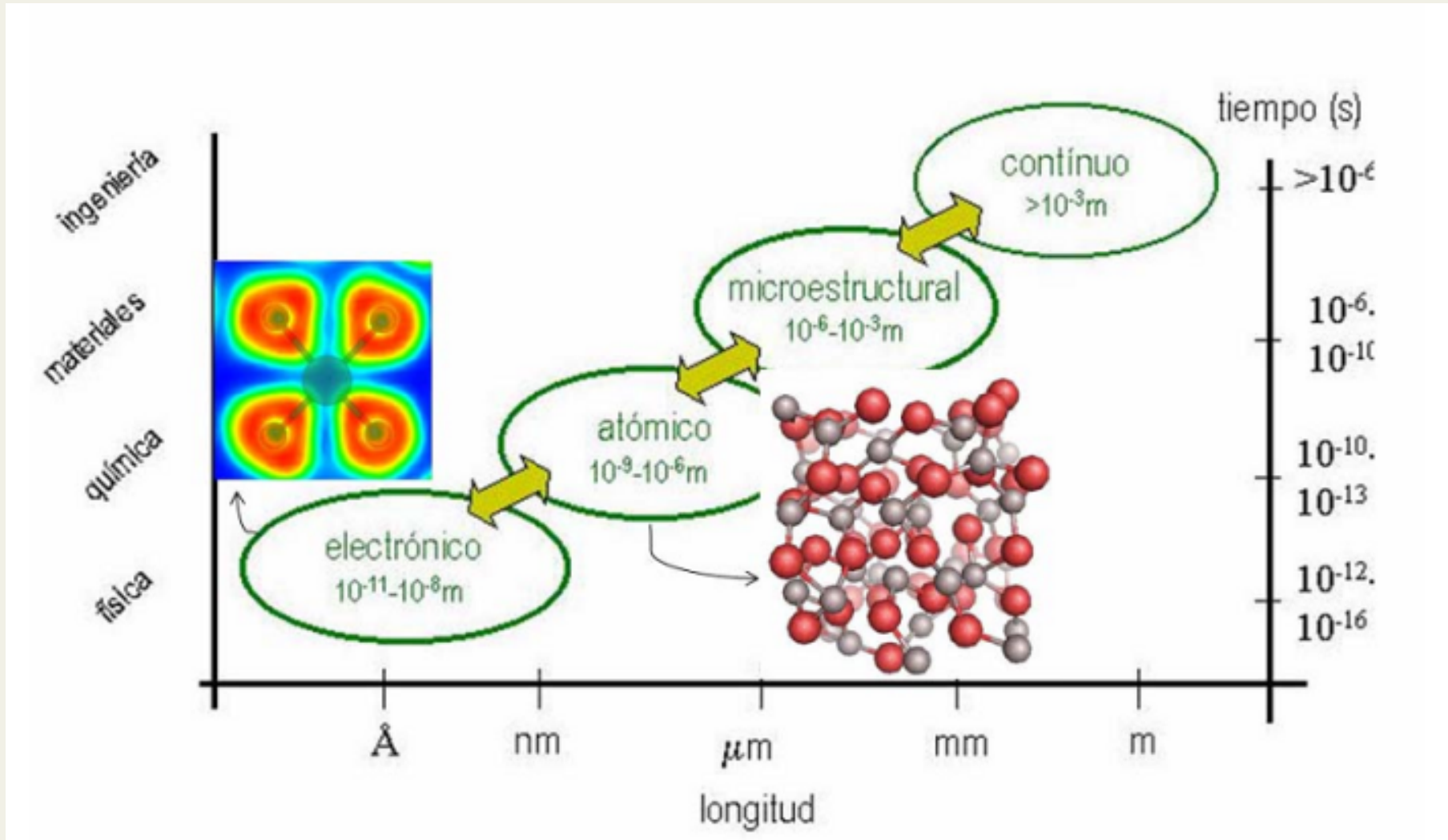
Universidad Politécnica de Madrid, 21 Ene. 2013

Grupo de NanoMateriales, U. de Chile

www.gnm.cl

- **Profs:** Eduardo Menéndez, Sergio Davis, Gonzalo Gutiérrez
- **Postdoc:** Emilio Figueroa, Germán Miño
- **Estudiantes postgrado:** F. González, Y. Navarrete, N . Amigo
- **Más de 10 estudiantes de pregrado por año**
- **Colaboradores en Chile y el extranjero.**

Simulación a nivel atómico



GNM: Areas de investigación

1. Fundamentos de la mecánica estadística:

- a) Teoría de fusión (melting)
- b) Teoría de información y probabilidad bayesiana
- c) estadísticas no-extensivas

2. Física de Materiales

- a) Vidrios: propiedades estructurales, dinámicas y mecánicas
- b) Materiales nano-estructurados: nanotubos de carbono
- c) Materiales en condiciones extremas, alta presión y/o temperatura
- d) Régimen plástico en metales: ductilidad y fractura
- e) Materiales celdas solares: propiedades electrónicas y ópticas
- f) Materiales Nucleares: daño por radiación Eduardo Bringa

3. Técnicas de simulación computacional

- a) Desarrollo y programación de Dinámica Molecular: Las Palmeras Molecular Dynamics, www.lpmd.cl
- b) Cálculos de energía libre y entropía
- c) Algoritmos paralelos para DM y montecarlo: mpi, CUDA

Plan

- Efecto de impurezas en cobre
- Deformación en vidrios metálicos en base a cobre
- Perspectivas futuro cercano: daño por radiación

Proyecto Cobre

Determinación de Propiedades Mecánicas de Productos de Cobre



Proyecto CODELCO-IM2 36-11
Responsable de Proyecto: M. Ignat

Marzo 2012

Miguel Ignat: Análisis propiedades mecánicas

- Docteur Ingenieur (1977), Docteur en-Sciences (1983)



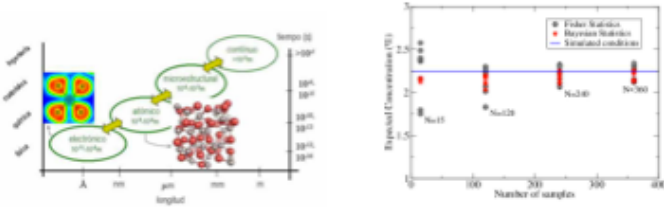
Álvaro Valencia: Análisis Termodinámico

- Dr-Ing. Ruhr-Universität Bochum, Alemania, 1993.



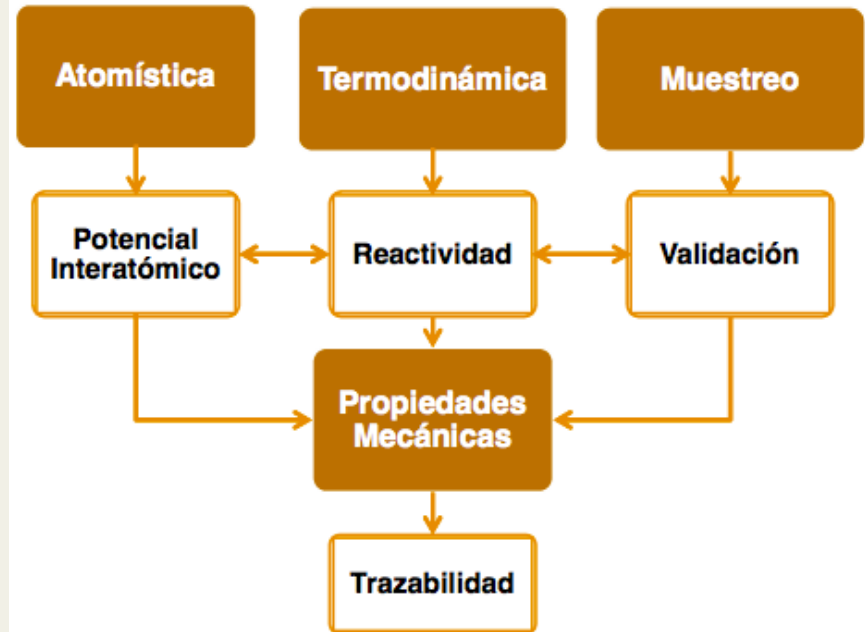
Gonzalo Gutiérrez: Modelización Atómica

- Doctor en Ciencias con Mención en Física, P. Universidad Católica de Chile, 1997

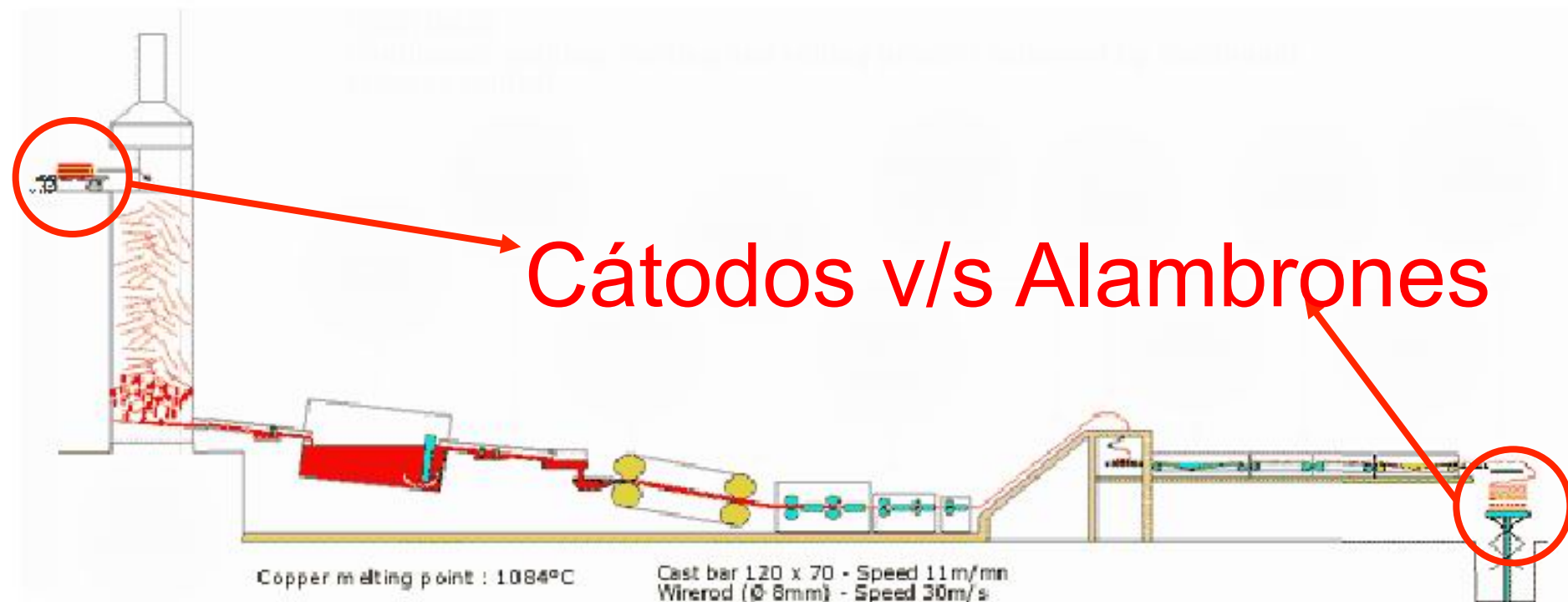


Sergio Davis: Estadística de Muestreo

- Ph.D in Applied Material Physics, Royal Institute of Technology (KTH), Estocolmo, Suecia (Septiembre 2009)



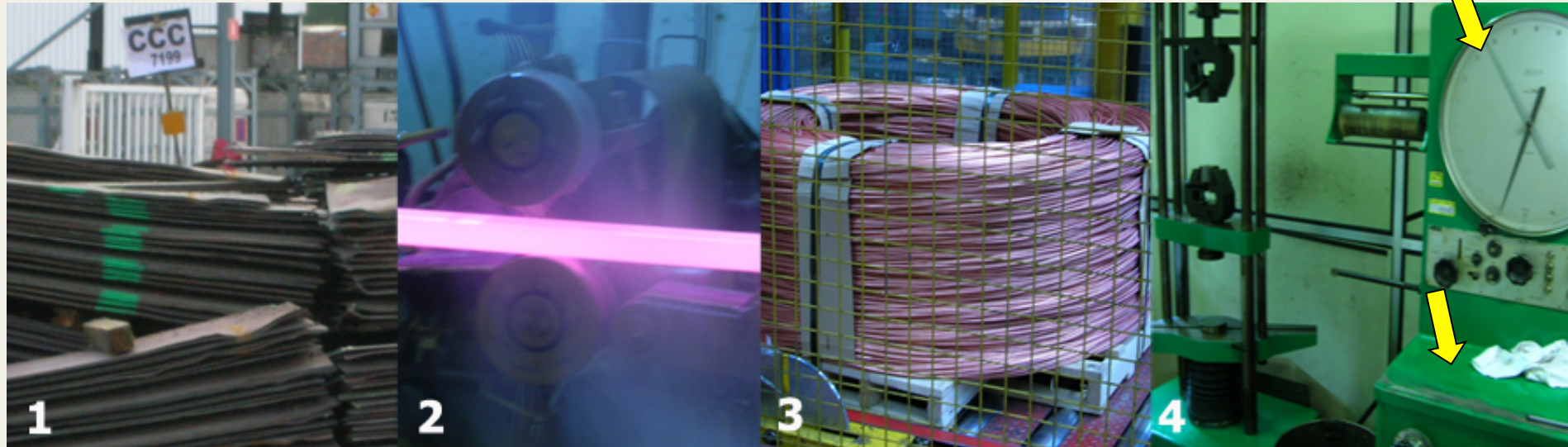
Cobre “Comercial”: de Cátodos a Alambrones



...la Calificación de los **Cátodos (de Chile)** se hace a partir de ensayos mecánicos sobre los **Alambrones (...en el extranjero)**.

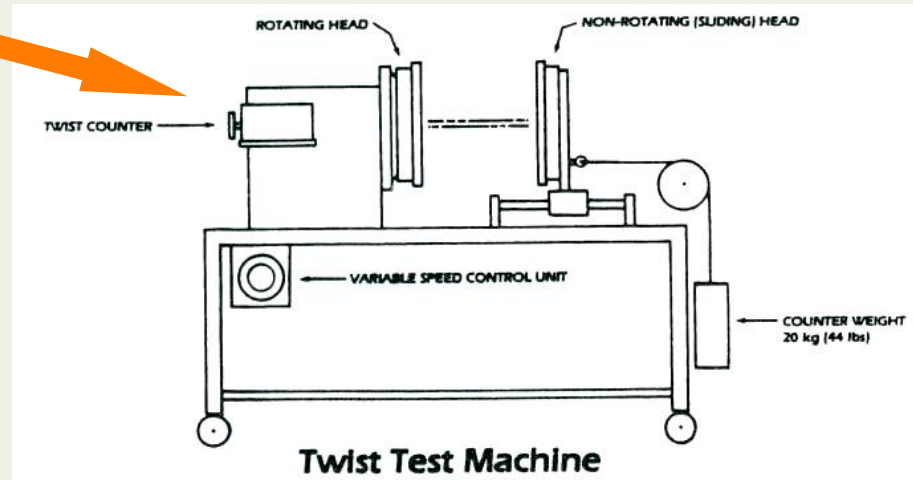
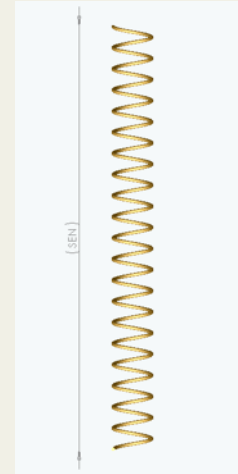
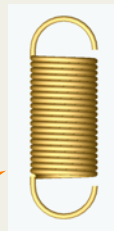
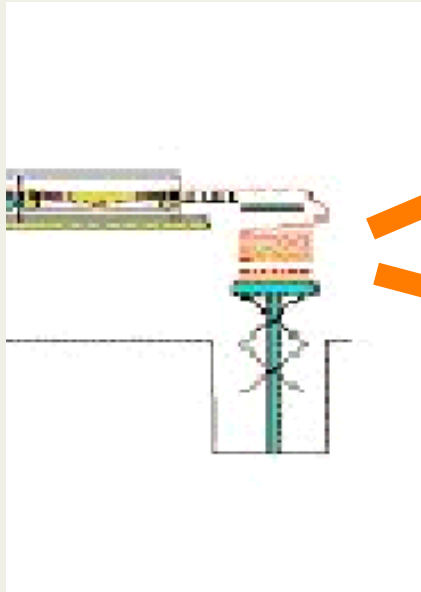
➔ **La “trazabilidad”, correlaciones entre Cobre de lotes de cátodos y los alambrones correspondientes.**

- Calificación de alambrones hecha por los productores de alambazón: Análisis Químico (AQ) y ensayo mecánico de Alargamiento Rápido (%AR).



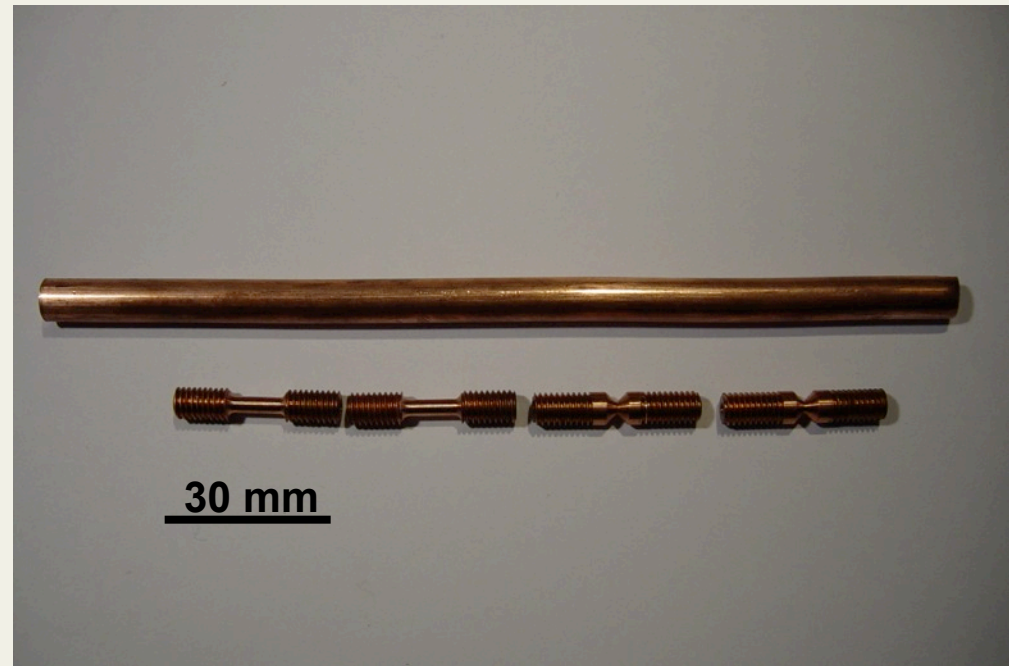
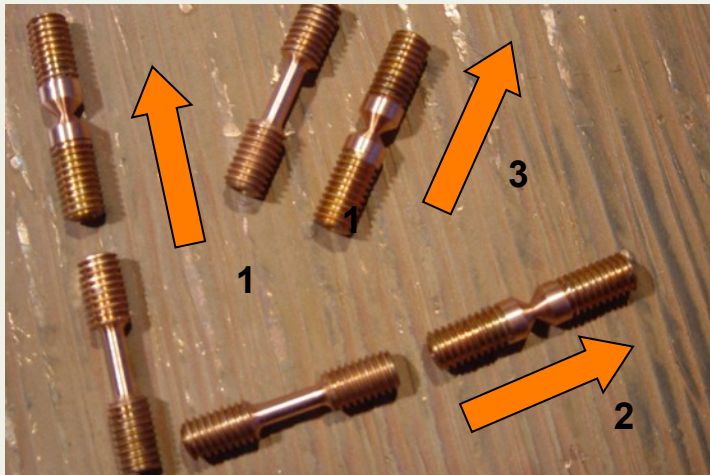
Antecedentes : ensayos Industriales y calificación.

*-Ejemplos: test del resorte y ensayo de torsión (BNFMRA),
alargamiento rápido (JPLavric, SCCC)*

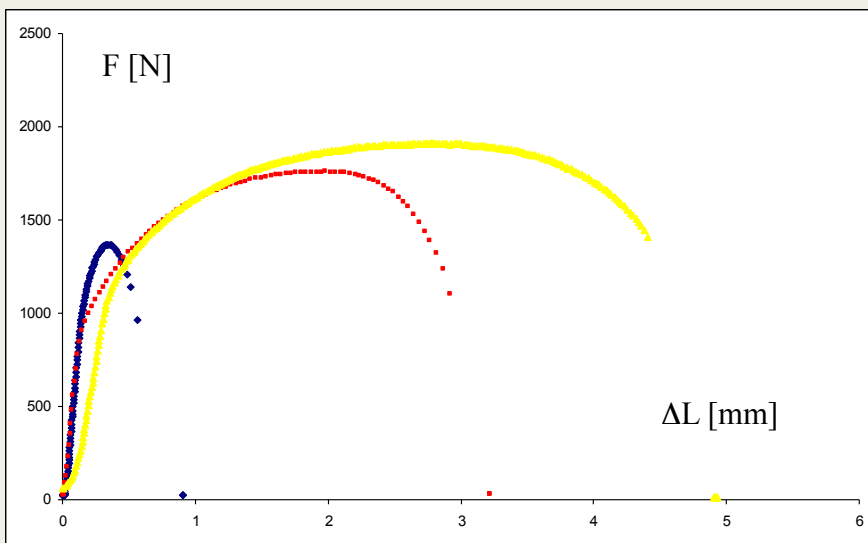
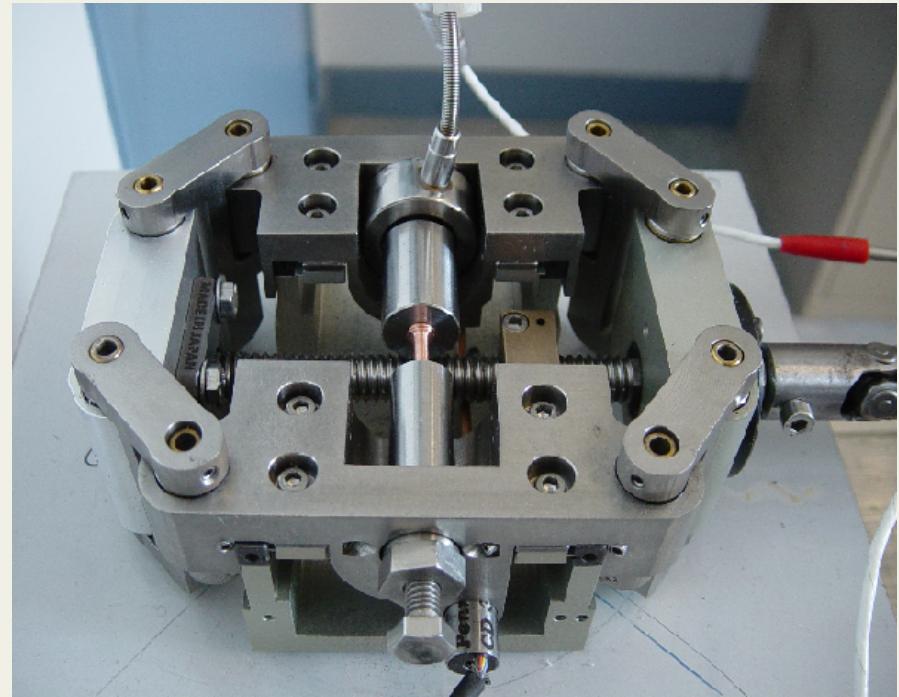
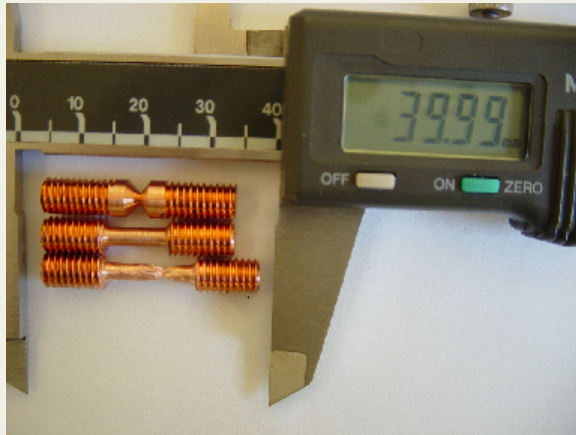


Metodología experimental: tipo de probetas y ensayos

(M. Ignat, 2012)



Probetas con y sin entalle : ensayos mecanicos de traccion, + analisis quimicos → efecto de las impurezas.



Normas de Ensayos :
Probetas de tracción simples, aplicables tanto a
Cobres de Catodos como de Alambrones.
Catalizadores de “fragilización”.

- Velocidad
- Triaxialidad*
- Temperatura

***practicados y normalizados para aceros y otros**
materiales metalicos.

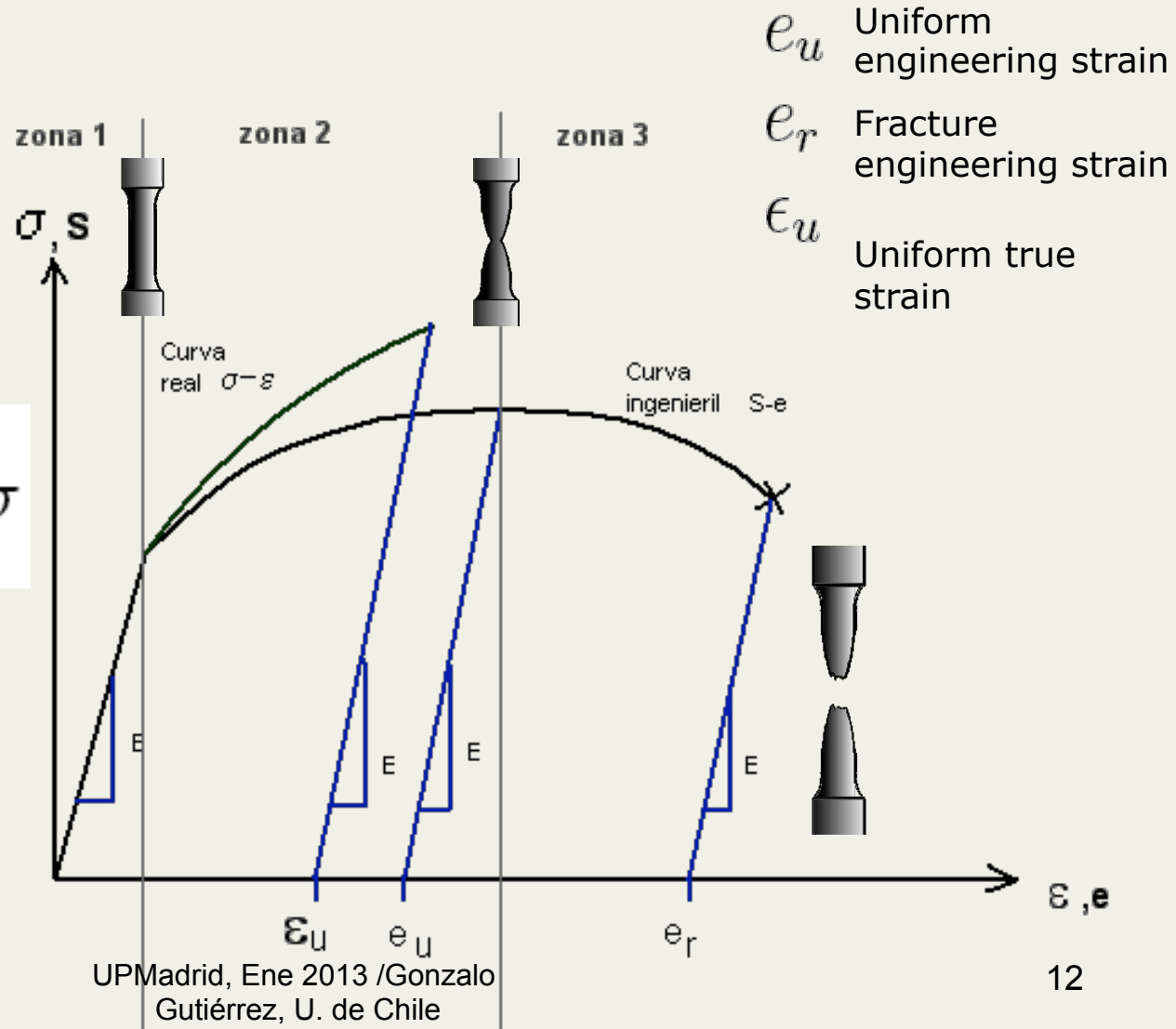
Análisis de Curvas de Tracción Procedimiento

- Ley de Hollomon

$$\sigma = k\epsilon^n$$

$$\frac{dS}{de} = 0 \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\epsilon} = \sigma$$

$$\Rightarrow n = \epsilon$$



Simulación a nivel atómico

- Objetivo general:

Estudiar, a nivel atómico, los efectos de impurezas, en particular Ag, As, Fe, Pb, S y Cu₂O en las propiedades mecánicas del cobre.
- Objetivos específicos:
 - a) estudiar la influencia de impurezas en las propiedades elásticas del cobre.
 - b) estudiar, por medio de simulación computacional a nivel atómico, la influencia de impurezas en las propiedades mecánicas del cobre: curva esfuerzo-deformaciones.
 - c) Analizar las interrelaciones entre propiedades mecánicas, impurezas y microestructuras en policristales. Fragilización, fractura.

Implementación simulación a nivel atómico de propiedades mecánicas del Cu

Nicolás Amigo, Tesis Magister

Dinámica molecular

Potencial interatómico de muchos cuerpos: embedded atom

Programas: LAMMPS / LPMD

Miles y millones de partículas.

Se ha obtenido:

Constantes elásticas

Curva de esfuerzo deformaciones

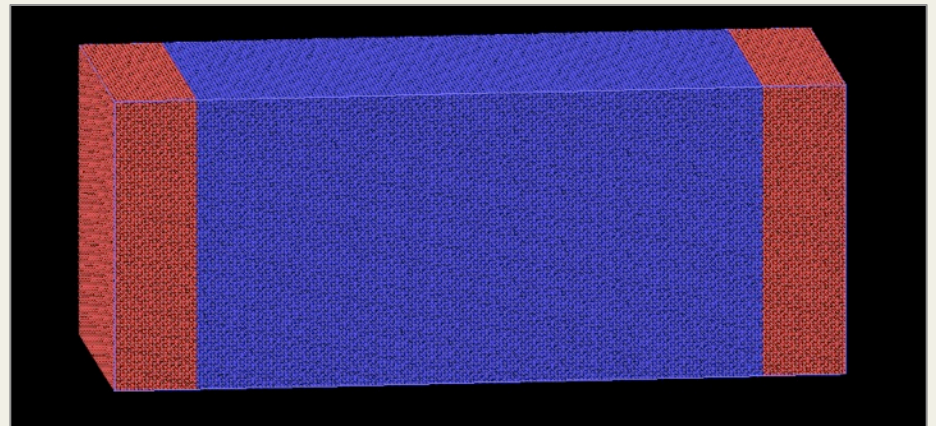
-monocristal

-policristal

Mono-cristal (a $T = 0$ K)

Datos (valores aproximados):

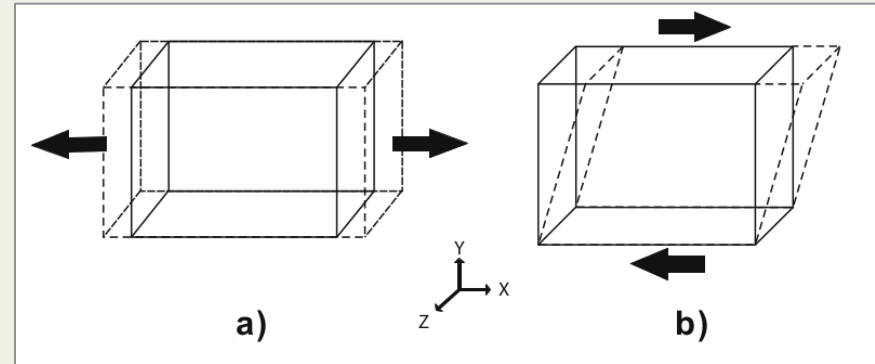
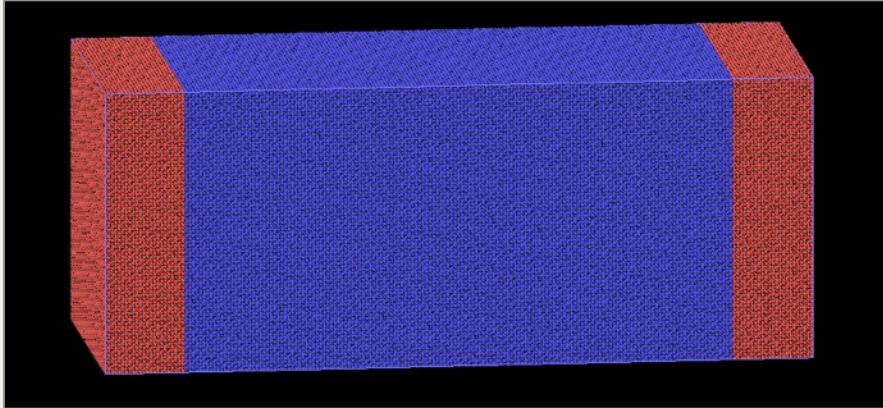
- 660 mil átomos
- 361 [Å] de largo
- 144 [Å] de alto y ancho



Constantes elásticas

$$C_{ijkl} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \epsilon_{kl}}, \quad (i, j, k, l = x, y, z)$$

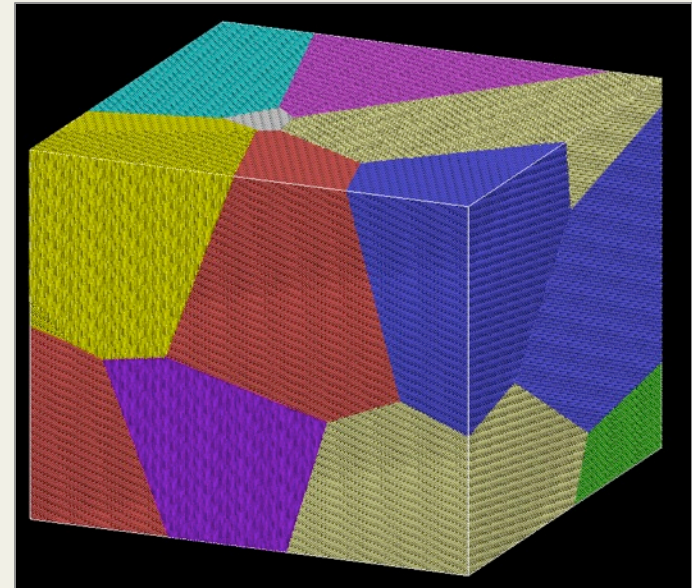
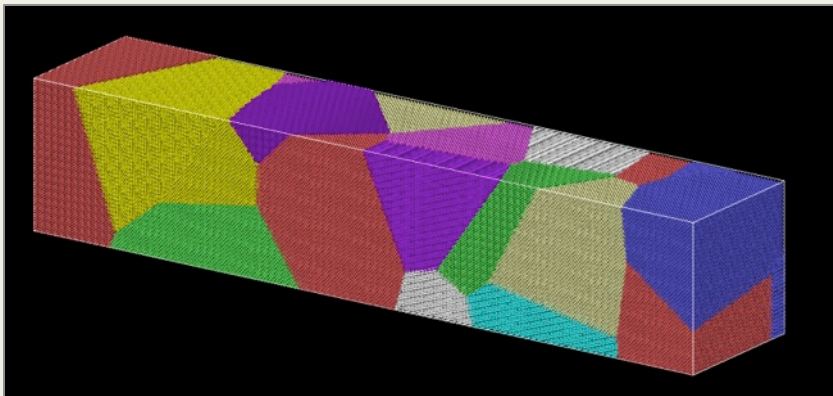
(Elastic properties of the bcc structure of Bismuth at high pressure,,
G. Gutiérrez, E. Menéndez-Proupin, and A. K. Singh,
Journal of Applied Physics 99, 103504 (2006))



Constante	Literatura [Gpa]	Simulación[Gpa]
C_{11}	176.2	171.0
C_{12}	125.0	126.3
C_{44}	82.0	79.9

Construcción de poli-cristales de cobre

- 1.3 millones de átomos
- 20 granos
- 722 [Å] de largo
- 140 [Å] de alto y ancho

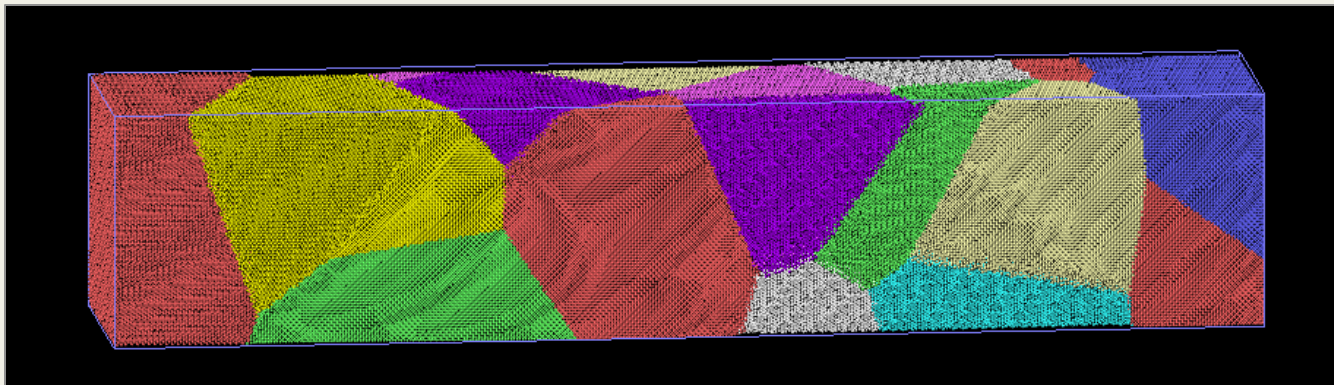


- 20 millones de átomos
- 20 granos
- 614 [Å] de arista

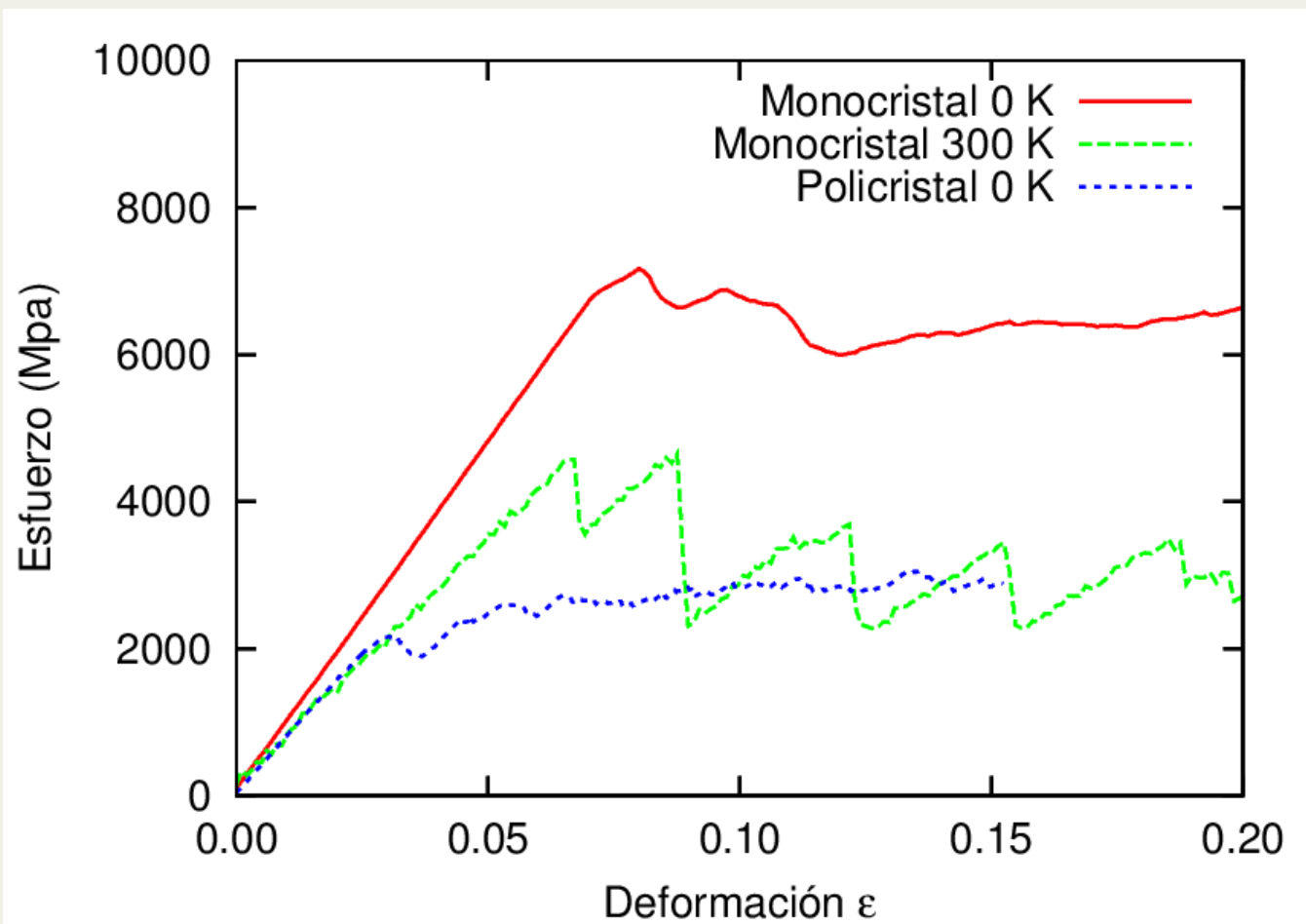
Poli-cristal

Datos (valores aproximados):

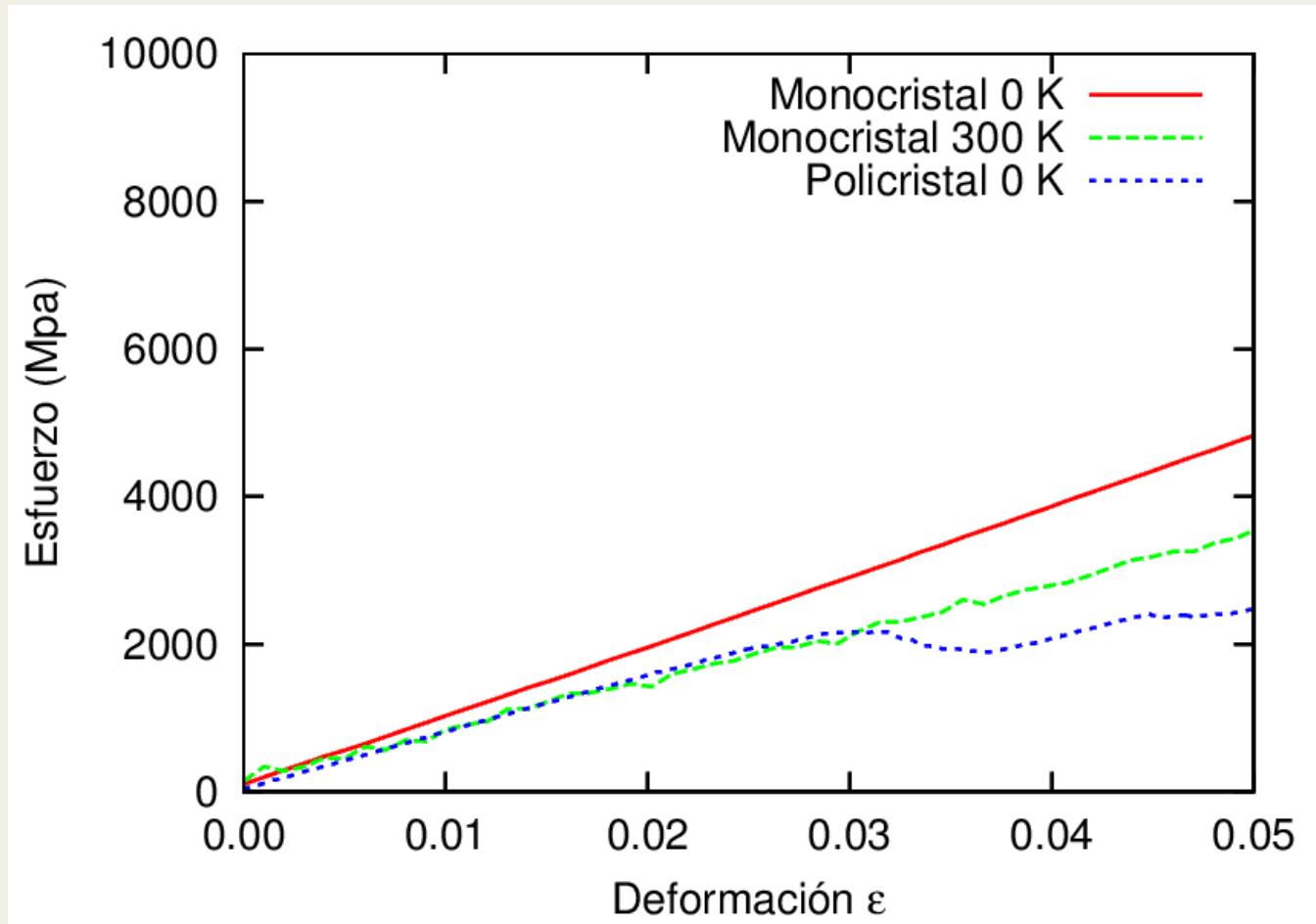
- 1.3 millones de átomos
- 720 [Å] de largo
- 20 granos
- 144 [Å] de alto y ancho



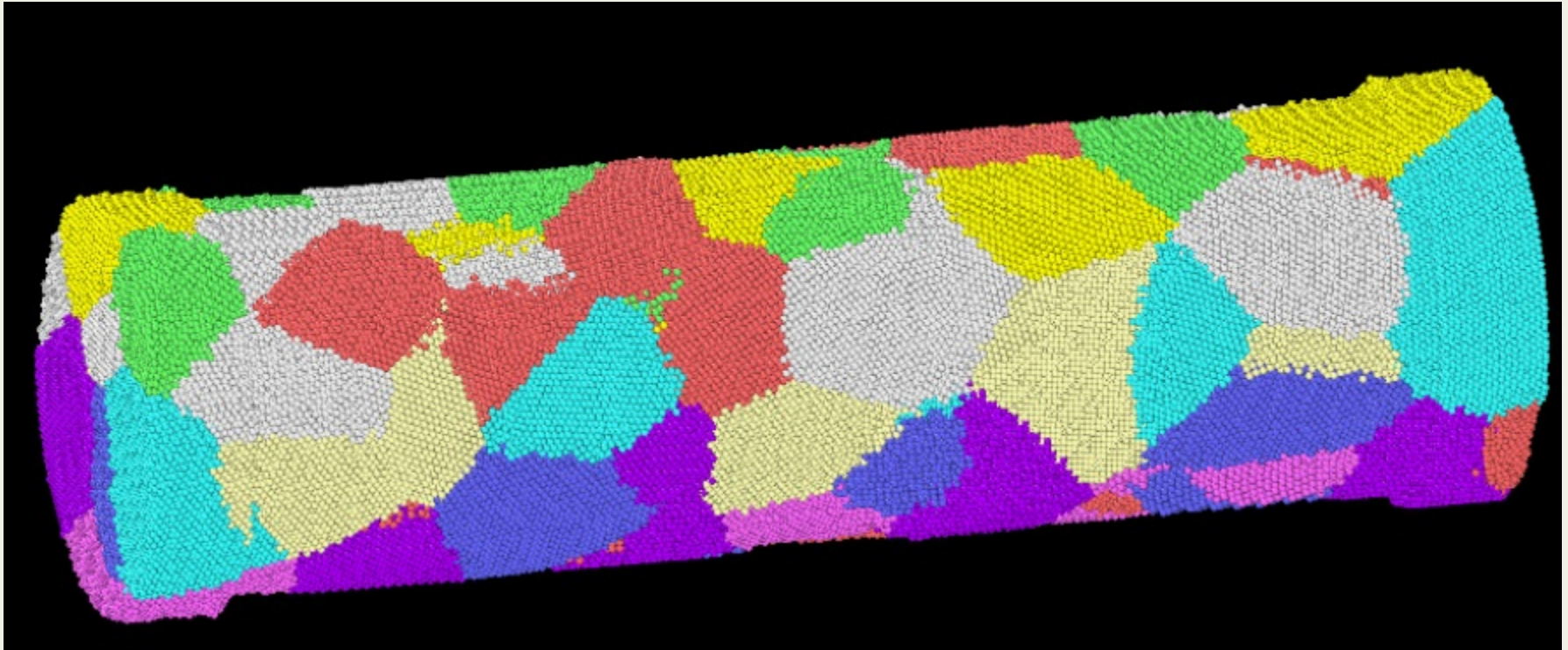
Ensayos de esfuerzo y deformación



Detalle a pequeñas deformaciones



Muestra Cu y Cu-Ag



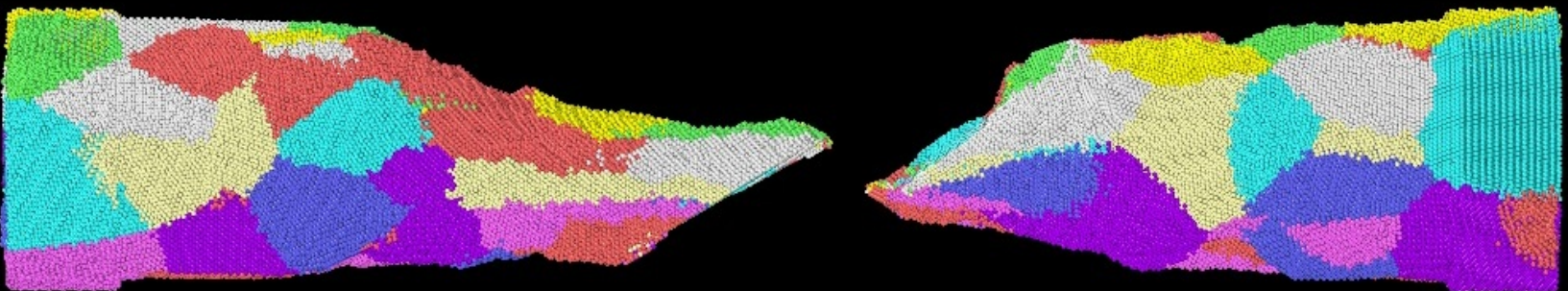
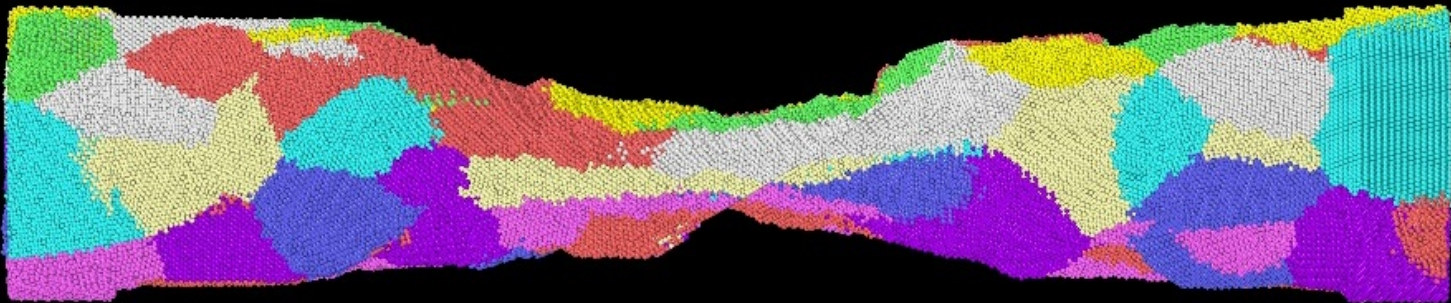
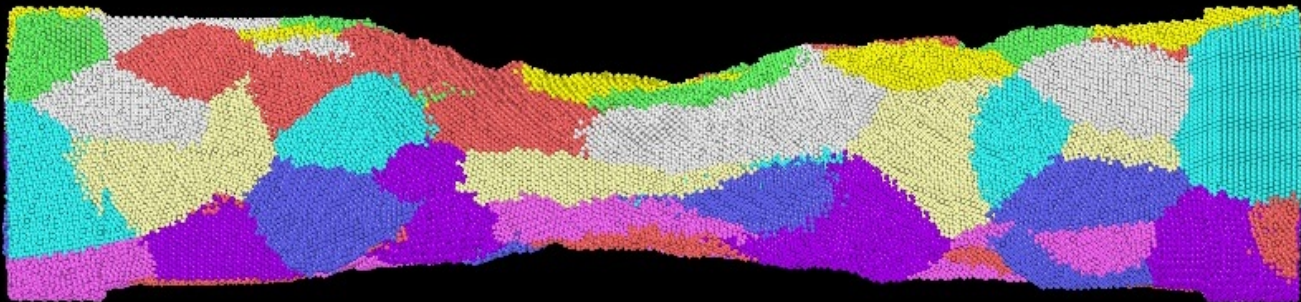
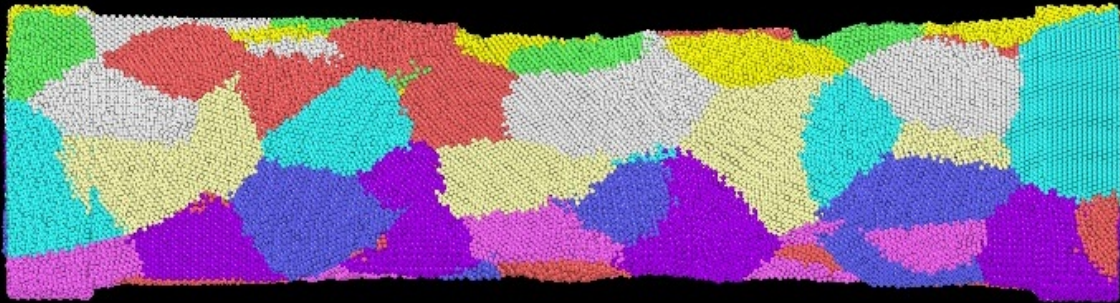
Sistemas Cu y Cu-Ag

Sistema 1 Cu puro

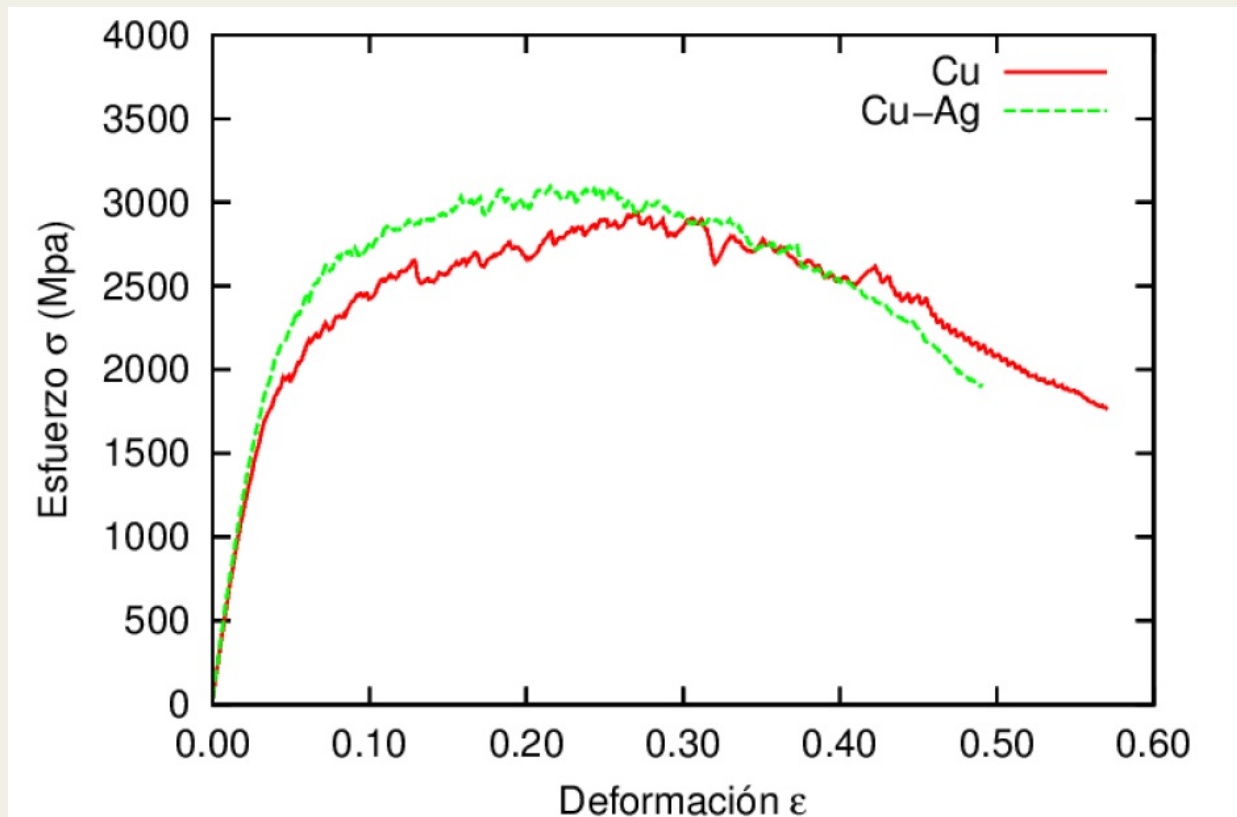
- Cu poli-cristalino cilíndrico
- 125 granos
- 500 mil átomos aprox.
- Largo 470 [Å] , radio 65 [Å]

Sistema 2 Cu-Ag

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



Curva esfuerzo-deformación



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

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.

Propiedades Mecánicas de Vidrios Metálicos

Introducción

Los vidrios metálicos han atraído gran atención debido a sus singulares propiedades como alta dureza, elasticidad y resistencia a la corrosión[1]. Recientemente R. Fernández *et al* [2], usaron la técnica de aspersión dinámica de gas frío (CDGS) logrando depositos compactos de vidrio metálico en base a cobre y zirconio. A raíz del buen resultado en la compactación surgen interesantes preguntas.

Mecanismo de deformación → Bandas de Corte

Se observa la formación de nanocristales en las bandas de corte?
(en experimentos si se presentan), investigación en desarrollo.

Caracterización estructural:

Structural and dynamical properties of the Cu₄₆Zr₅₄ alloy in crystalline, amorphous and liquid state: a molecular dynamic study,

C. Valencia-Balvín, C. Loyola, J. Osorio and G. Gutiérrez.

Physica B **405**, 4970-4977 (2010)

Propiedades Mecánicas de Vidrios Metálicos

Existe un método de fabricación de vidrios metálicos de tamaño grande (1mm-1cm). Cold Gas Dynamic Spray (CGDS), que utiliza gran velocidad de deformación donde la observación experimental es difícil.

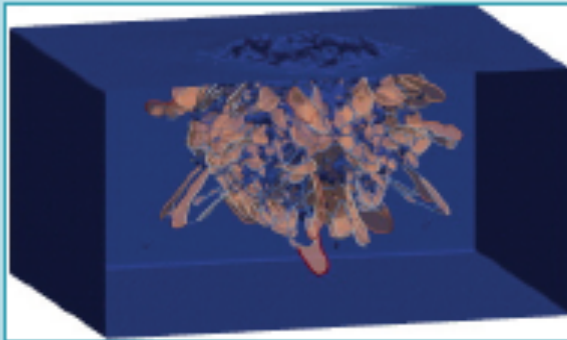
Surge la idea de modelar este proceso de impacto para entender la deformación del vidrio metálico sometido a altas velocidades de deformación.

Experimentos Convencionales (Tracción y compresión) se realizan a bajas velocidades de deformación, del orden de 1×10^{-4} a $1 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$.

Dinámica Molecular permite modelar tracción o compresión con velocidades de deformación más bien altas, del orden de 1×10^4 a $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$.

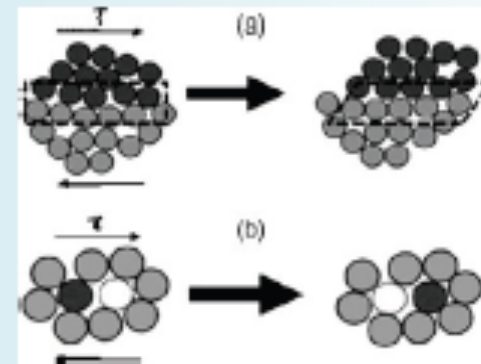
Propiedades Mecánicas de Vidrios Metálicos

En cristales el proceso de deformación plástica es a través de las dislocaciones. **¿Cómo se deforma el vidrio metálico?**



Material cristalino:

- Dislocaciones
- Deslizamiento de planos



¿Material amorfo?

- Zonas de transformación de corte.
- Salto atómico local

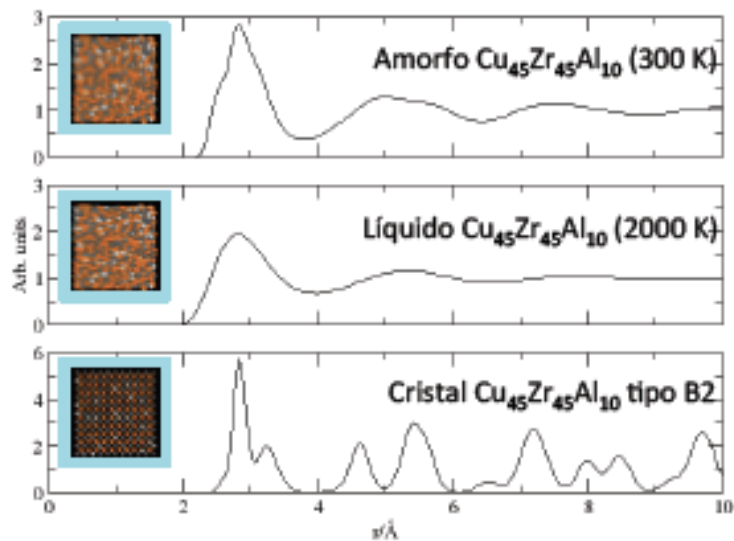
Impacto entre proyectil y blanco de vidrio metálico

Metodología

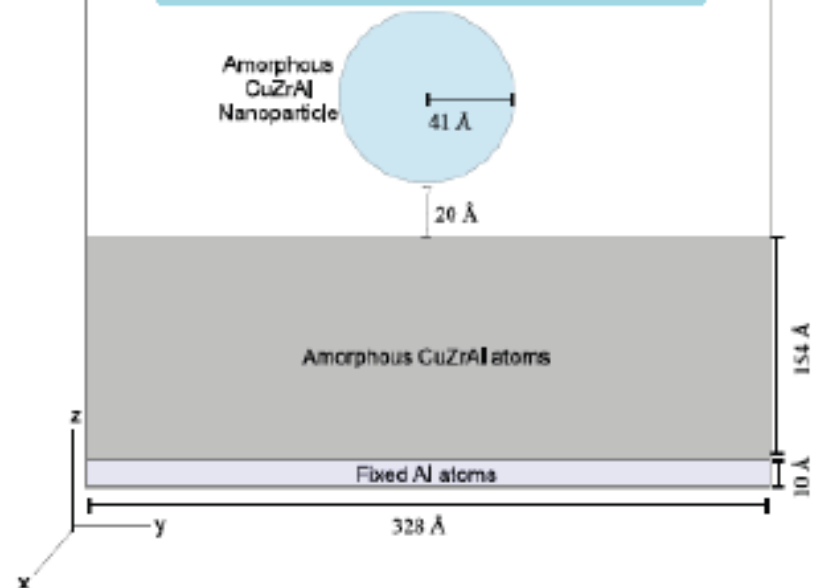
- 1.-Se generaron muestras de vidrio metálico de la aleación $\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{45}\text{Al}_{10}$, mediante calentamiento y enfriamiento rápido de un modelo de CuZrAl cristalino tipo B2.
- 2.-Analizamos las muestras con herramientas de diagnóstico como la función de distribución de pares.
- 3.-Diseño de la simulación de impacto.
- 4.-Dinámica molecular usando LAMMPS[3]. Potencial de átomo embebido (EAM)[4]. Colectividad NVE y condiciones de borde periódicas para el sustrato en direcciones x e y.

Javier Wachter (2012).

Función de distribución de pares

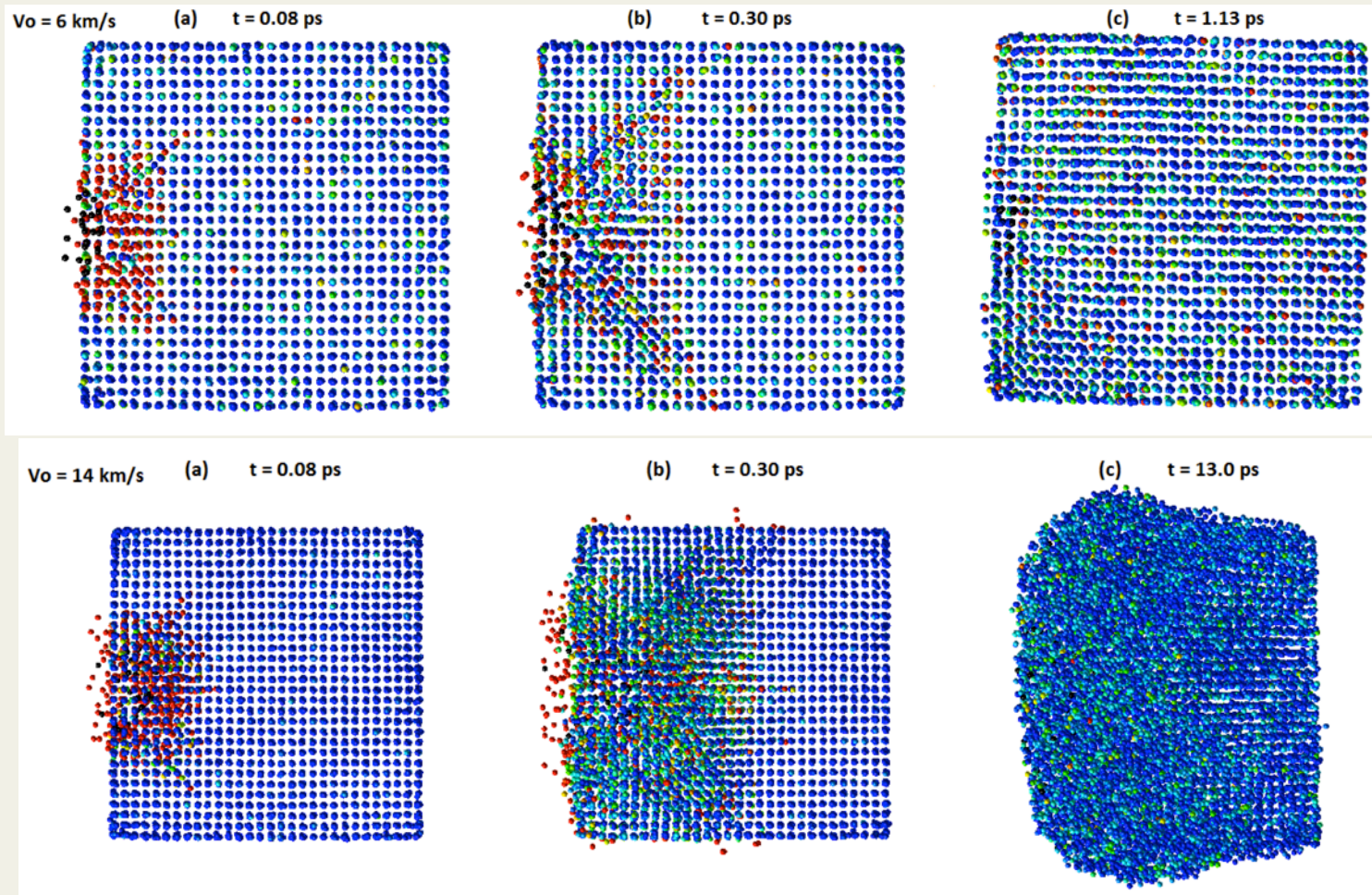


Configuración inicial del impacto.

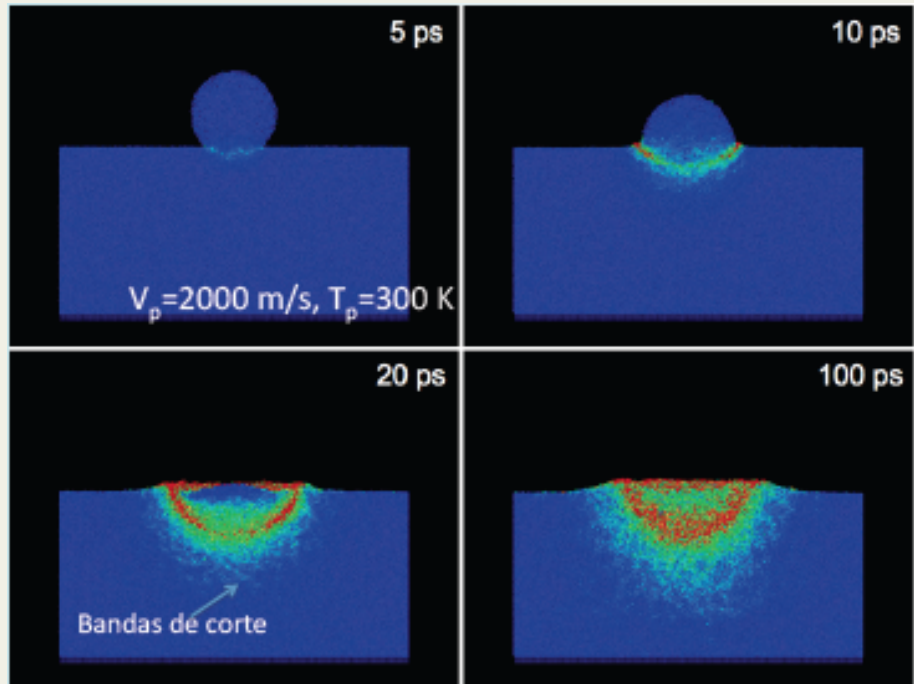
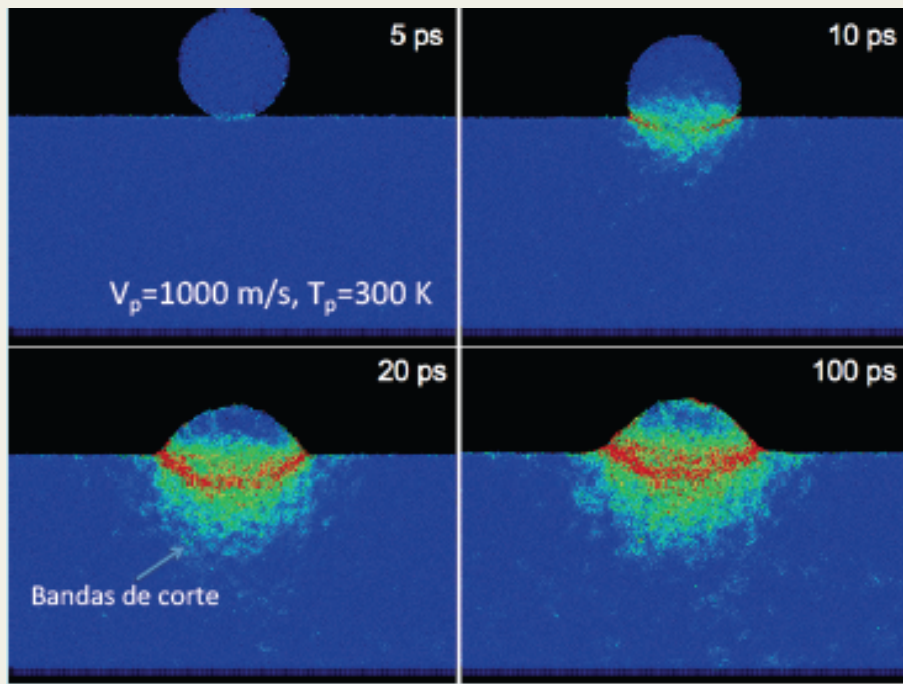
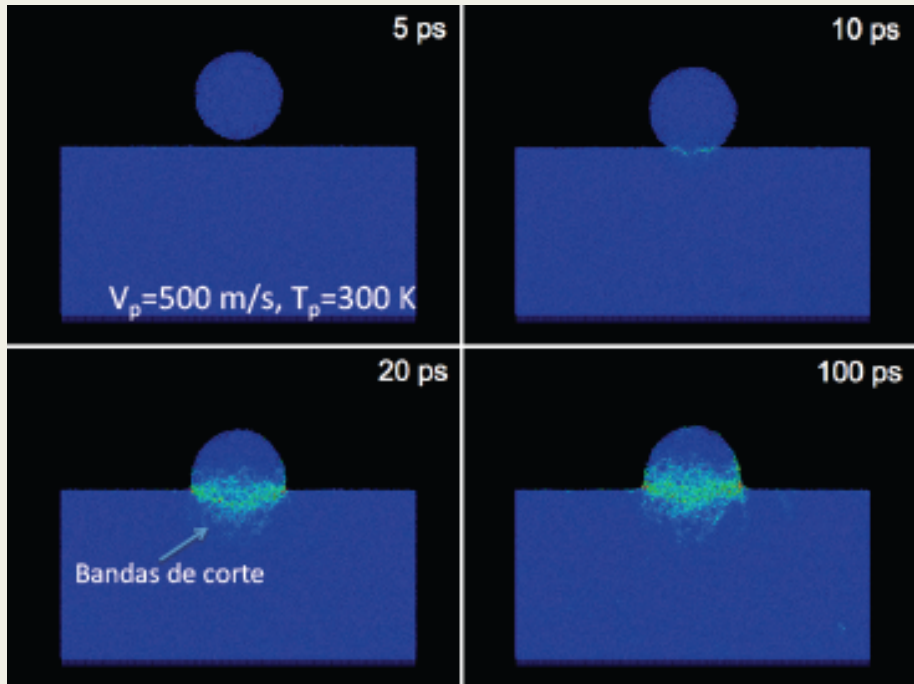


¿Qué ocurre en el impacto de proyectiles en medios amorfos?

En caso cristalino, el mecanismo de deformación es por dislocaciones:



Hypervelocity impact of copper nano-projectiles on copper,
 N. Amigo, C. Loyola, S. Davis and G. Gutiérrez..
 Computational Materials Science 68, 245 (2013).



Tesis de doctorado en
Materiales, FCFM, U de Chile

Javier Wachter (2012).

Resultados y discusión

-Incrustación. De acuerdo a la velocidad inicial de la partícula, se observan dos regímenes: para velocidades menores a 2000 m/s parte de la partícula queda fuera del blanco, mientras que a velocidades mayores que 2000 m/s se verifica una incrustación completa.

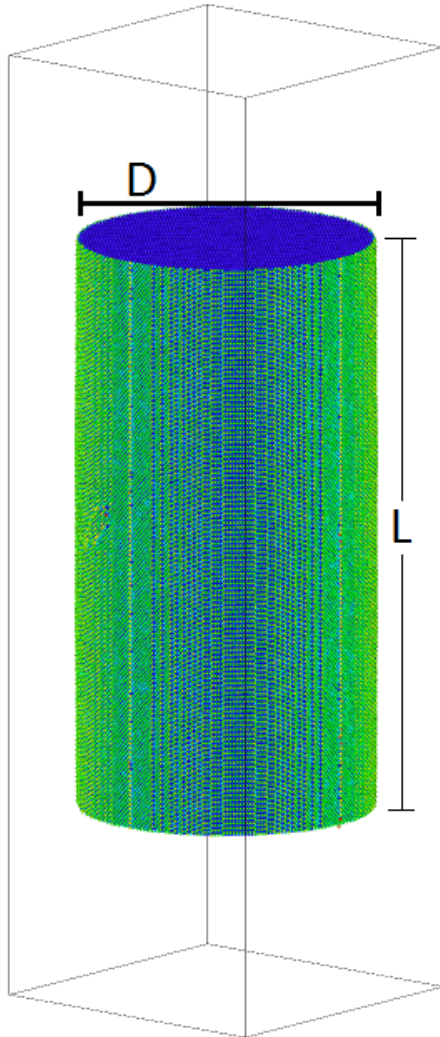
-La variación de la temperatura de la partícula entre 100 K y 300 K produce similares resultados para cada velocidad inicial.

-Se aprecia la formación de bandas de corte. Las bandas mantienen su estructura, pero pierden definición hacia el final de la simulación (100 ps).

Perspectivas: simulaciones de daño por radiación

(trabajos en progreso con Emilio Figueroa + E. Bringa +SD)

Daño por radiación en oro.



$$L/D \sim 2$$

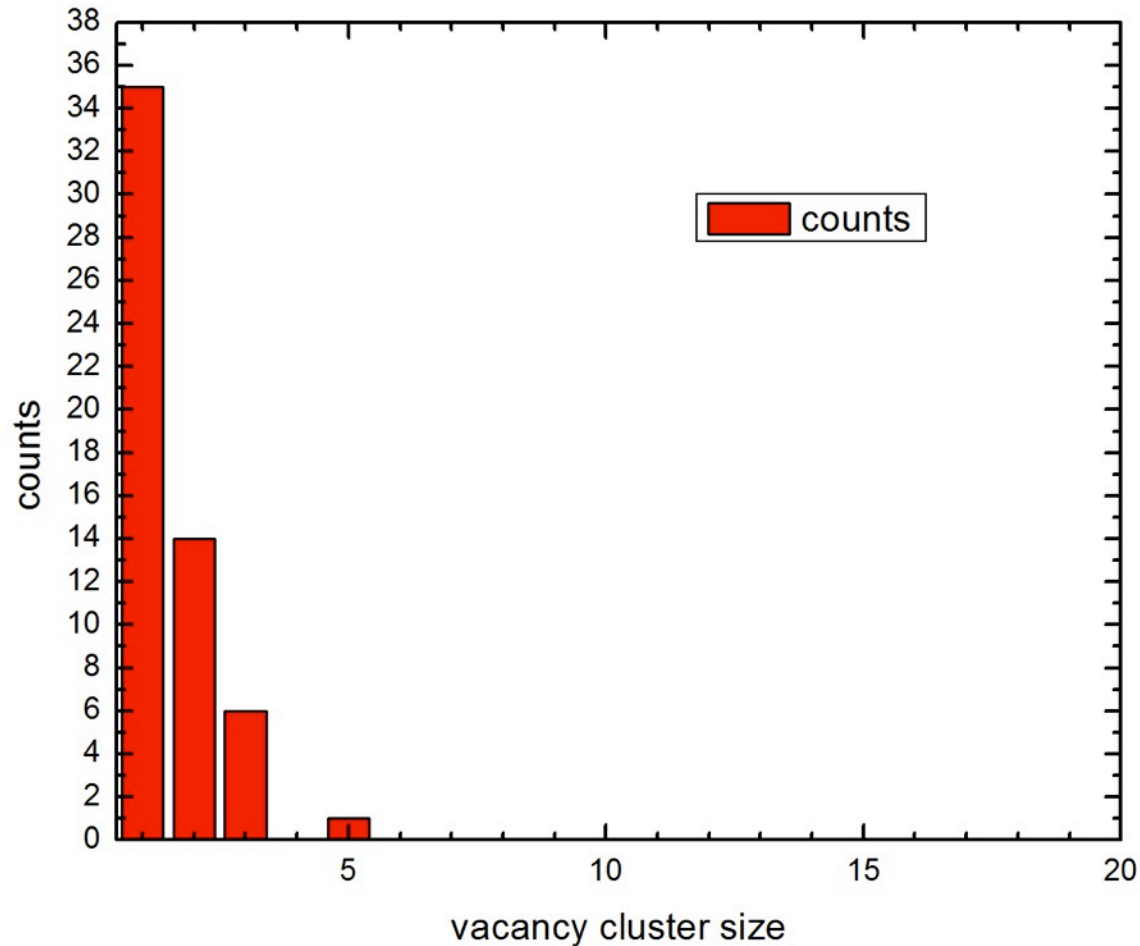
$$D \sim 25 \text{ nm}$$

1.500.000 átomos

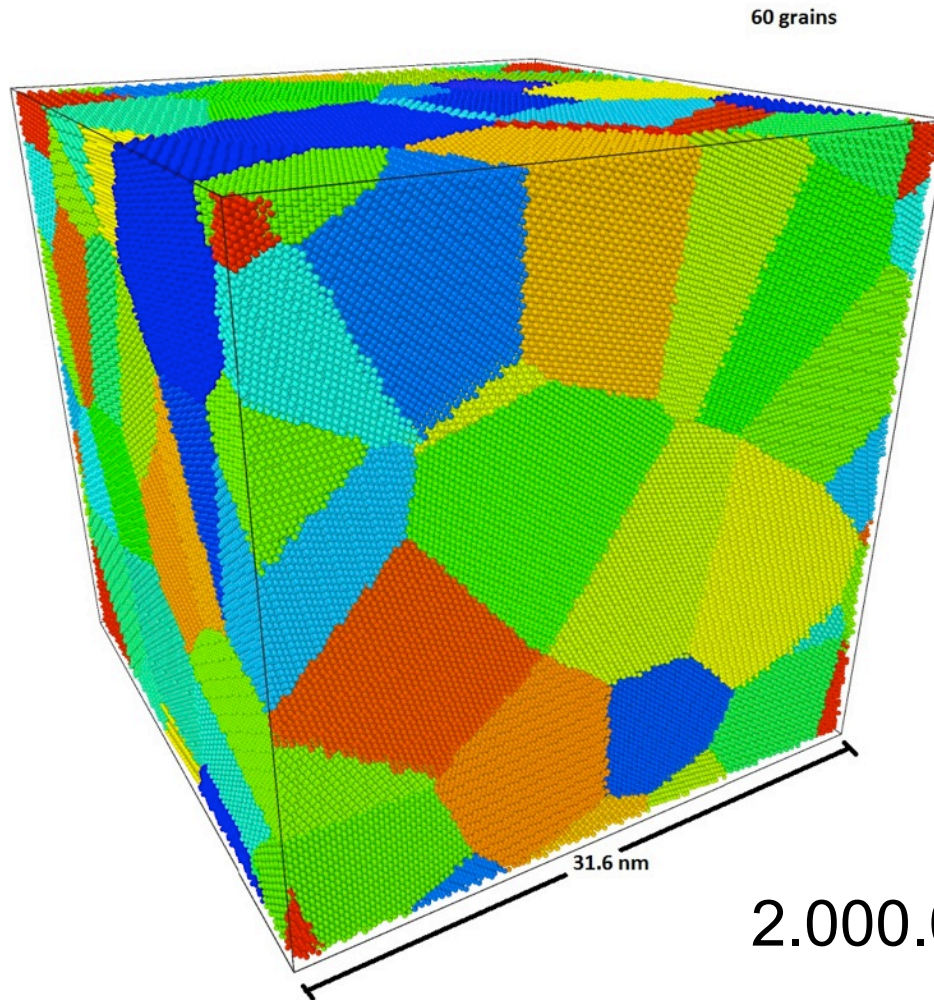
PKA 20 keV

Histograma de frecuencia de tamaño de cluster de las muestras.

El siguiente corresponde a la muestra anterior:



W nanocristalino



Plan de trabajo:

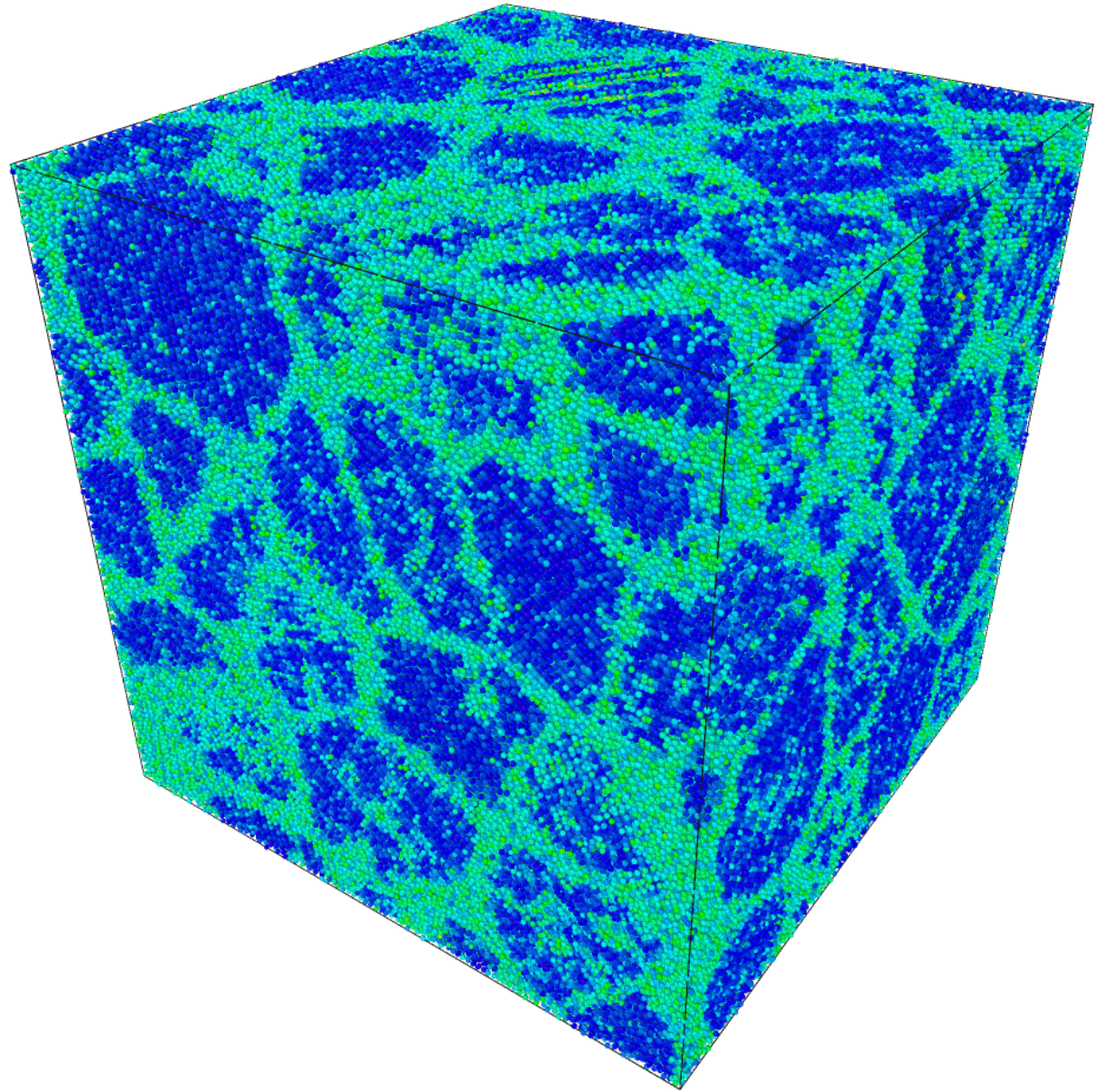
- Caracterización estructural:
LPMD: $g(r)$, CNA, $D(w)$, ...
- Pruebas mecánicas:
esfuerzo versus deformación
- Introducir impurezas de H:
caracterización + pruebas mecánicas
- Daño por radiación: PKA
caracterización + pruebas mecánicas

$T=3000\text{ K}$

Color indica
desorden
local, va desde
el azul hasta el
rojo.

Azul:
ordenado,
granos bcc.

Rojo:
desordenado,
bordes de
grano.



FIN

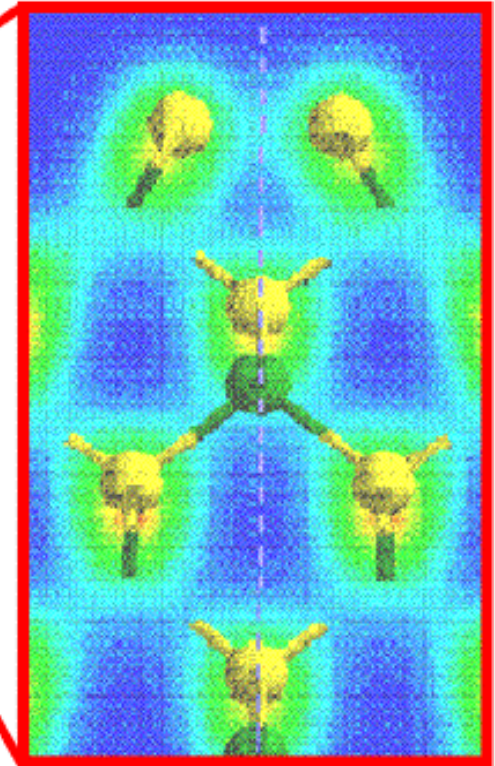
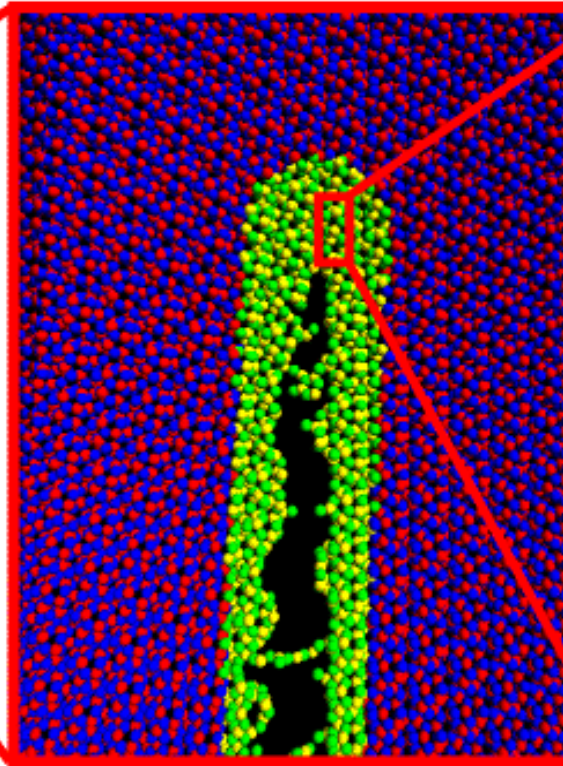
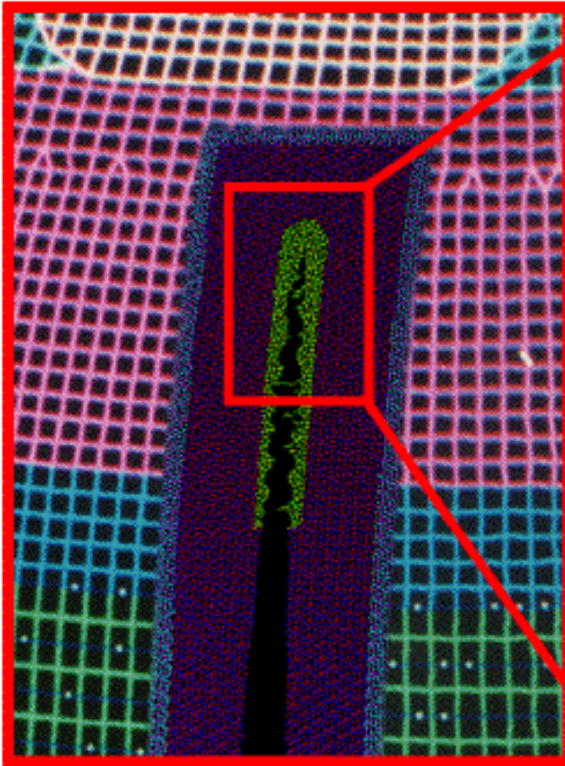
¡Muchas gracias!

Simulación multiescala

Finite Element Simulation
Continuum Elasticity

Atomistic Simulation
Newton's Equation

Electronic Simulation
Schrödinger's Equation



Finite Element + 10^9 -atom MD + 10^4 -atom DFT

26 sec/step on 1,024 T3E

2 hr/step on 1,024 T3E

(CACS, USC)

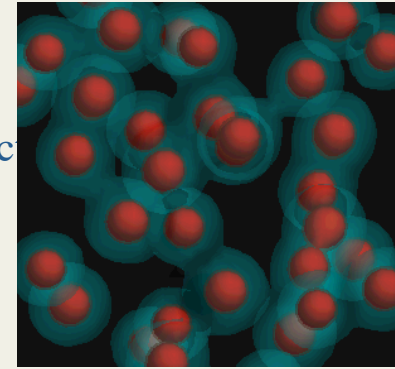
Metodologías

- **Mecánica Cuántica (Density Functional Theory)**

Funciones de onda electrónica: $\{\psi_n(\mathbf{r}) \mid n = 1, \dots, N_{\text{elec}}\}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V_{\text{ion}}(\mathbf{x}) + \int d^3x' \frac{e^2 \rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + \frac{\delta E_{\text{XC}}}{\delta \rho(\mathbf{x})} \right] \psi_n(\mathbf{x}) = \varepsilon_n \psi_n(\mathbf{x})$$

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{x})|^2; \quad \int d^3x \psi_m^*(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x}) = \delta_{mn}$$



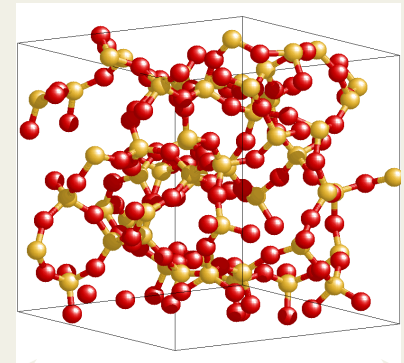
10^{-11} - 10^{-8} m

- **Dinámica Molecular**

Traectorias Atómicas: $\{\mathbf{r}_i(t) \mid i = 1, \dots, N_{\text{atom}}\}$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial V(\mathbf{r}^N)}{\partial \mathbf{r}_i}$$

Ensembles; funciones correlación

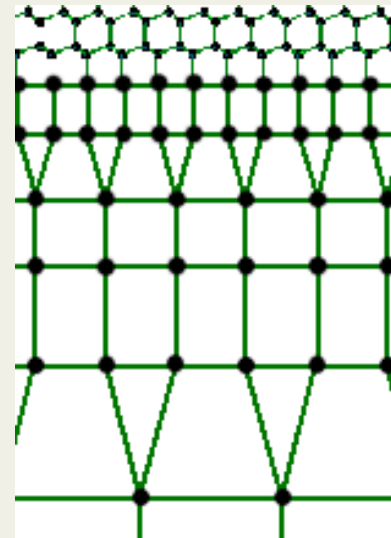


10^{-9} - 10^{-6} m

- **Mecánica del continuo**

Campos de desplazamiento: $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$

$$\rho \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{\sigma}$$



$>10^{-7}$ m

http://www.grantadesign.com/wing/index.html

Google Envoyer Mes favoris Autoriser les fenêtres pop-up Orthographe Envoyer à Paramètres

Adobe Y! Rechercher Installez la mise à jour de Ya... Ouvrir session Y! Mail Questions/Réponses

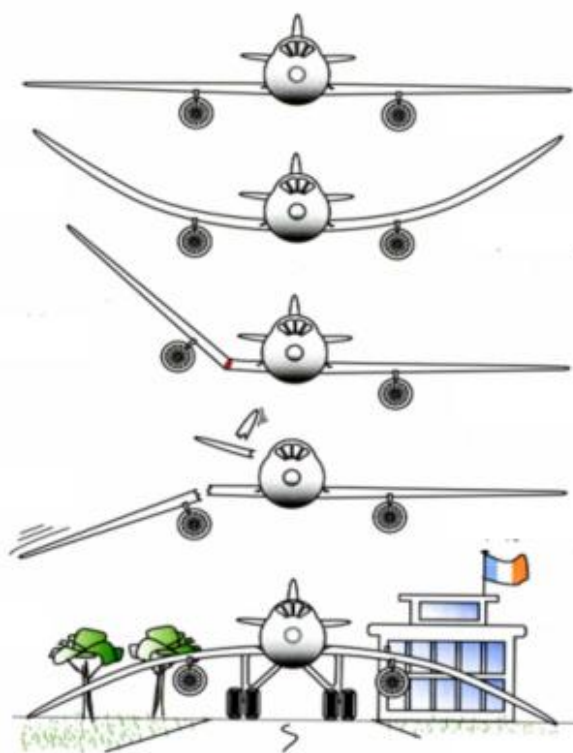
Granta - CES EduPack 2008 ... Aircraft Wing Case Study

Page Outils



Material Selection for Aircraft Wings

GRANTA



Stiff
Strong
Tough
Light } All OK !

← Not stiff enough (need bigger E)

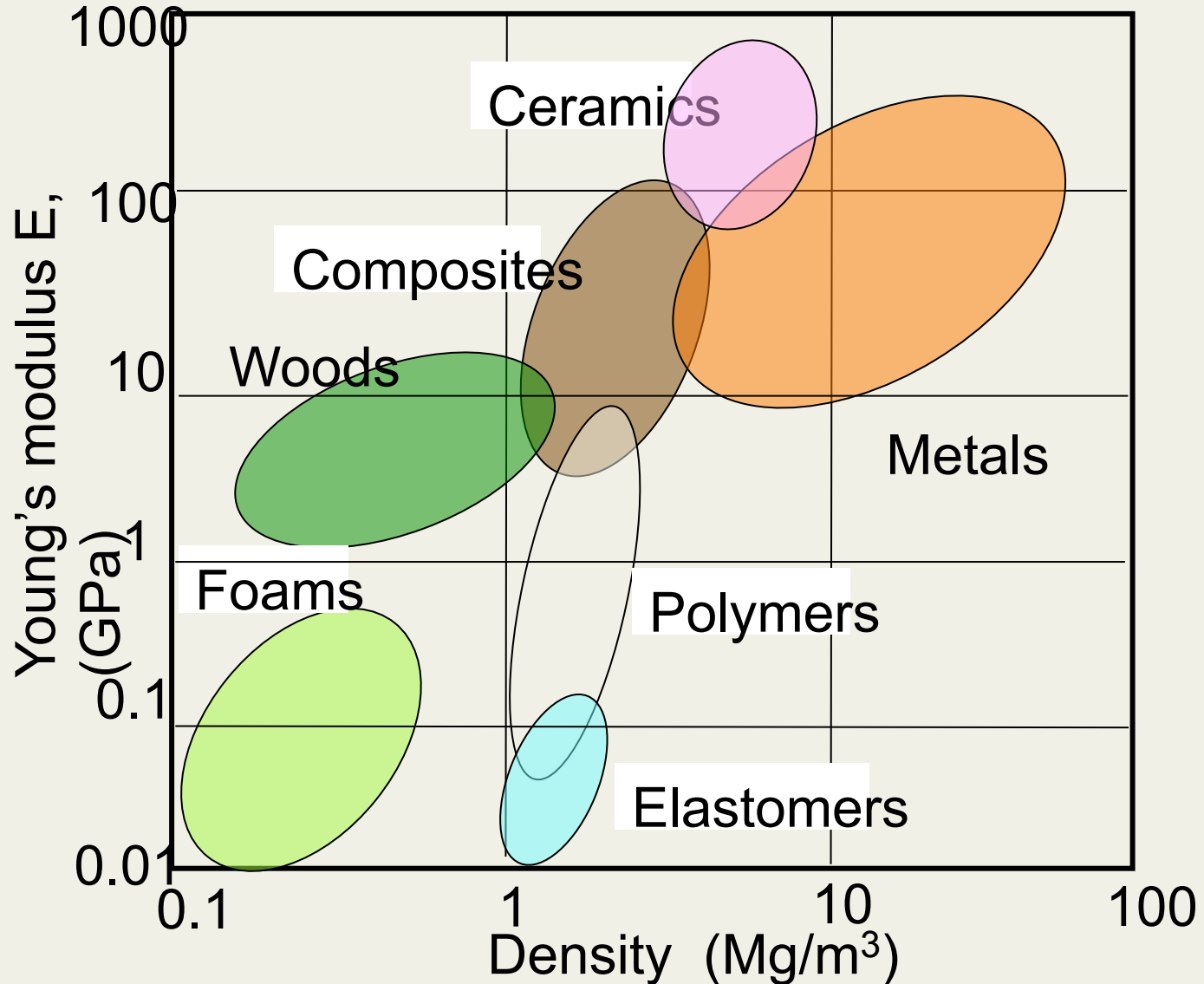
← Not strong enough (need bigger σ_y)

← Not tough enough (need bigger K_{ic})

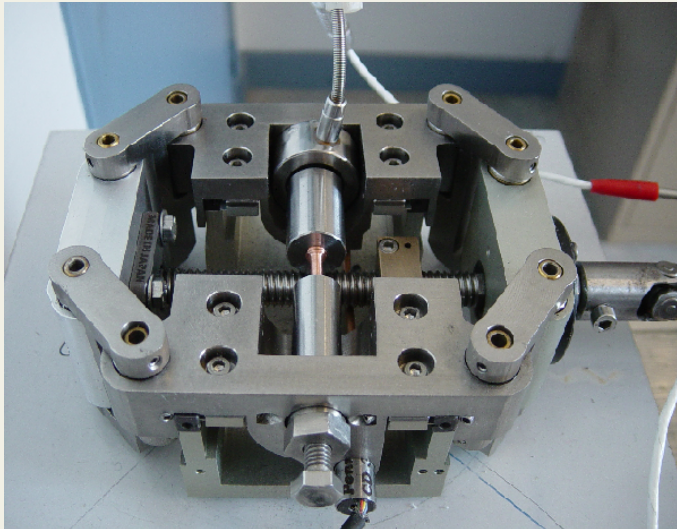
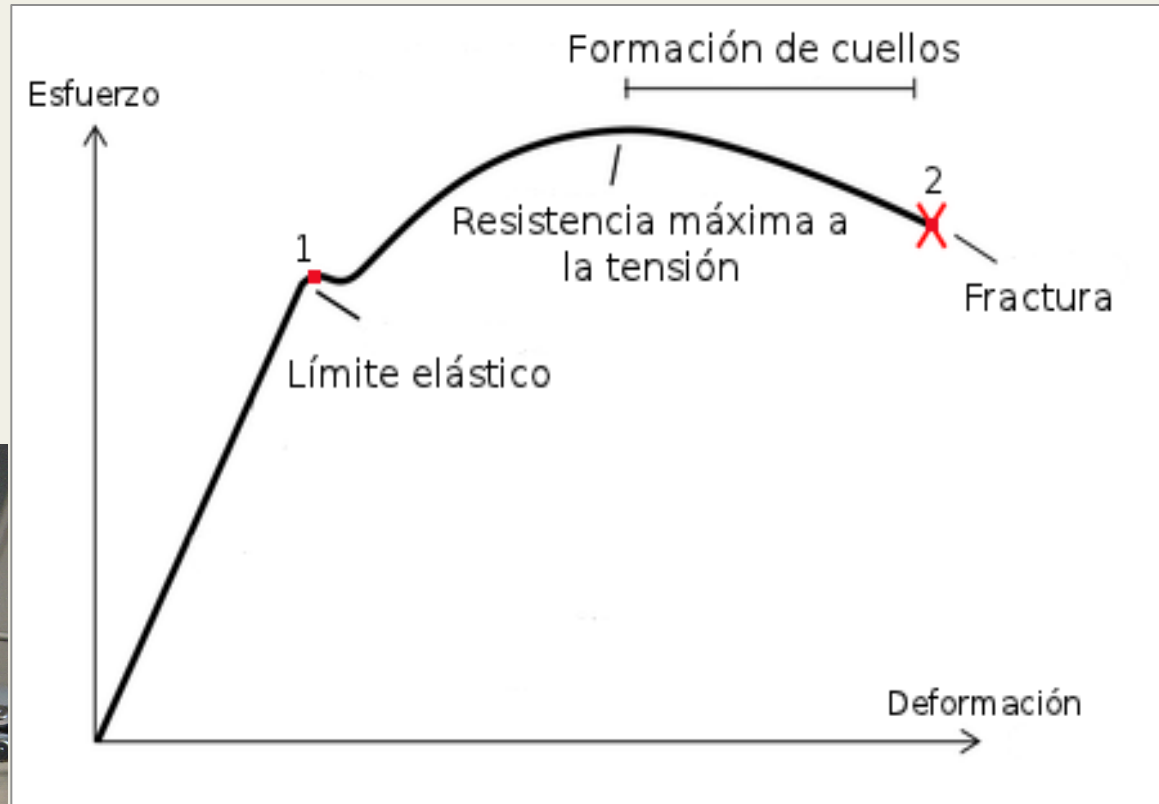
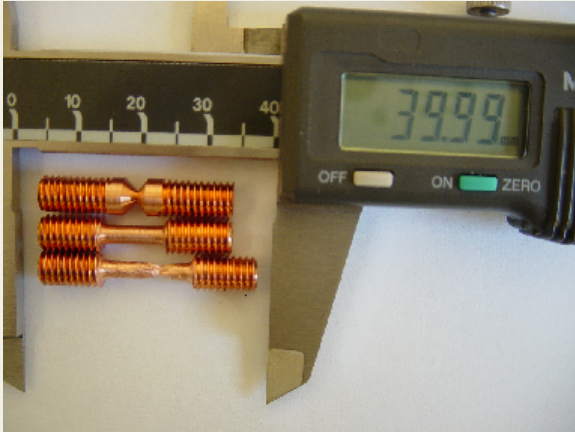
← Too heavy (need lower ρ)



Propiedades mecánicas



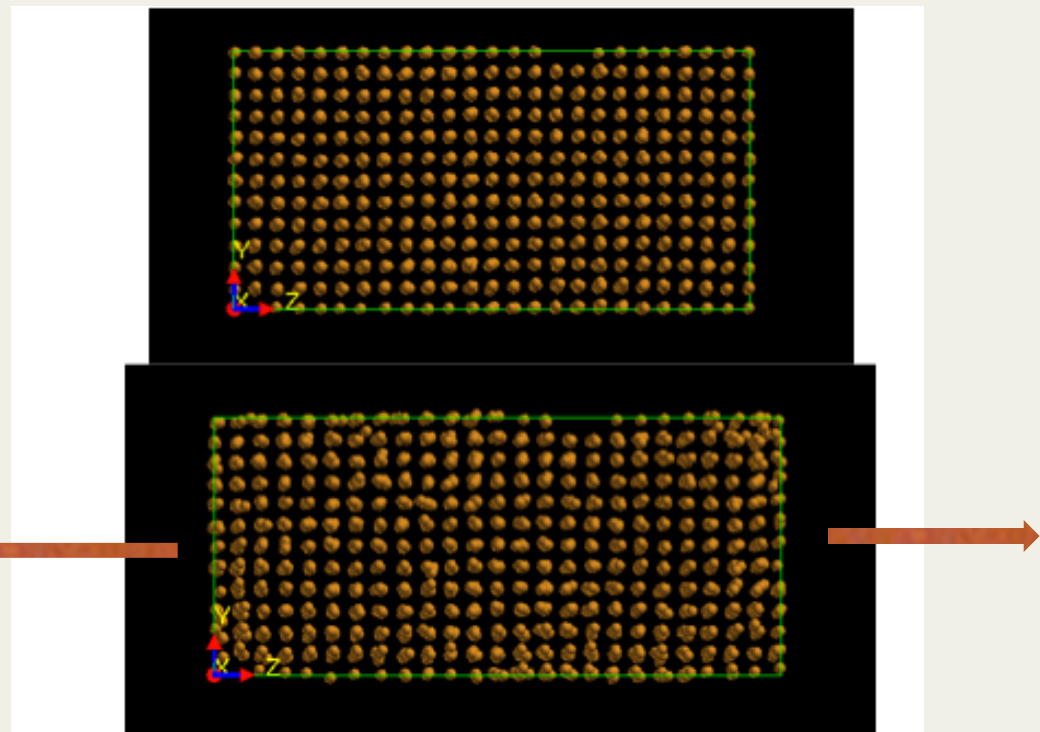
Visión “macroscópica”: ensayos mecánicos



Clasificación

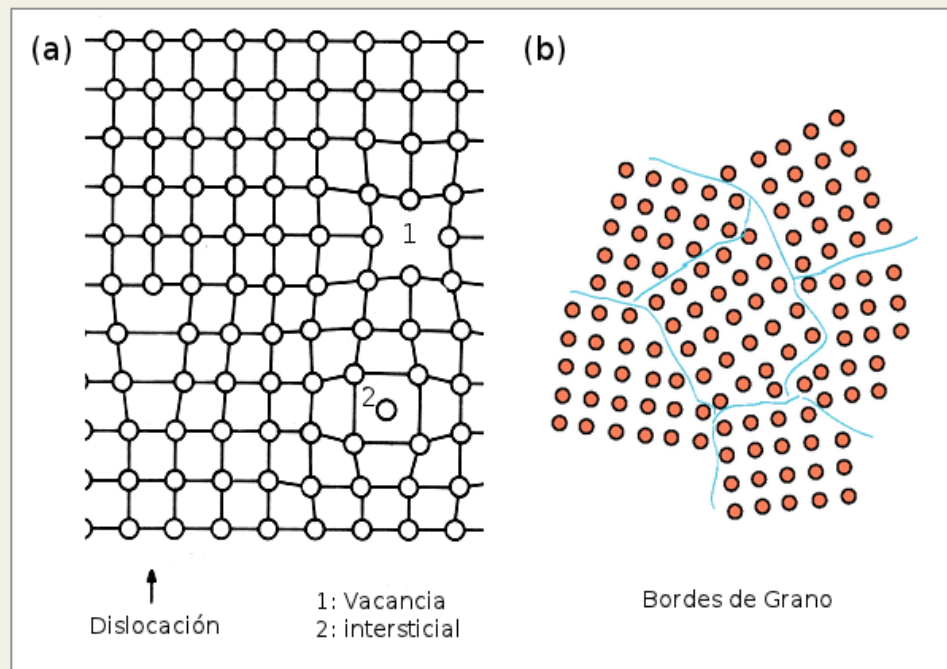
Régimen elástico: - constantes elásticas
- módulos elásticos: Young, Poisson

Régimen plástico:
- deformación homogénea
- deformación inhomogénea



¿Que gobierna las propiedades mecánicas?

- Potencial interatómico
- Defectos cristalinos: puntuales, lineales, superficiales
- Microestructura: tamaño y tipo de grano



Regimen plástico: dislocaciones y deslizamiento de granos (M Lagos)

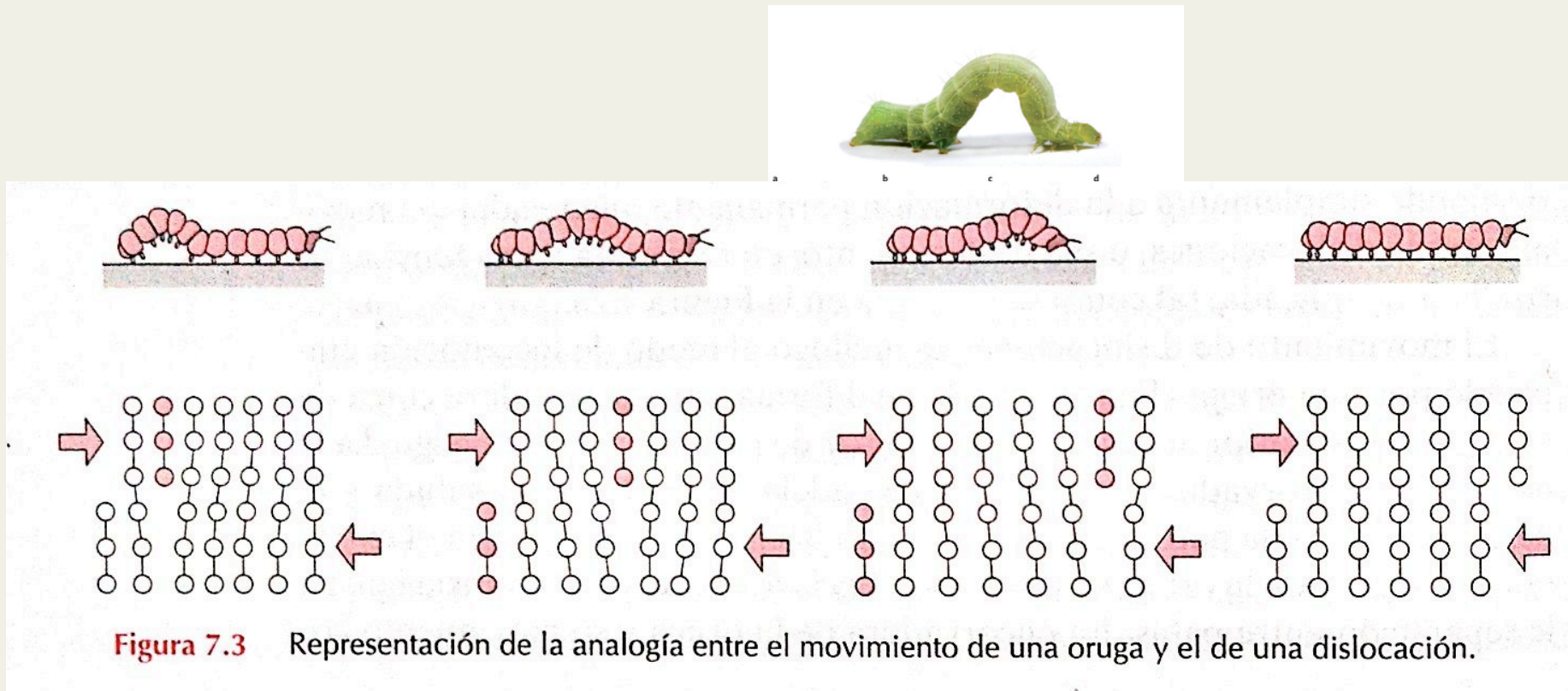


Figura 7.3 Representación de la analogía entre el movimiento de una oruga y el de una dislocación.