



# Propiedades mecánicas de materiales: estudio mediante simulación computacional

---

Gonzalo Gutiérrez,

Grupo de NanoMateriales,

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile

[gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl](mailto:gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl)

[www.gnm.cl](http://www.gnm.cl)

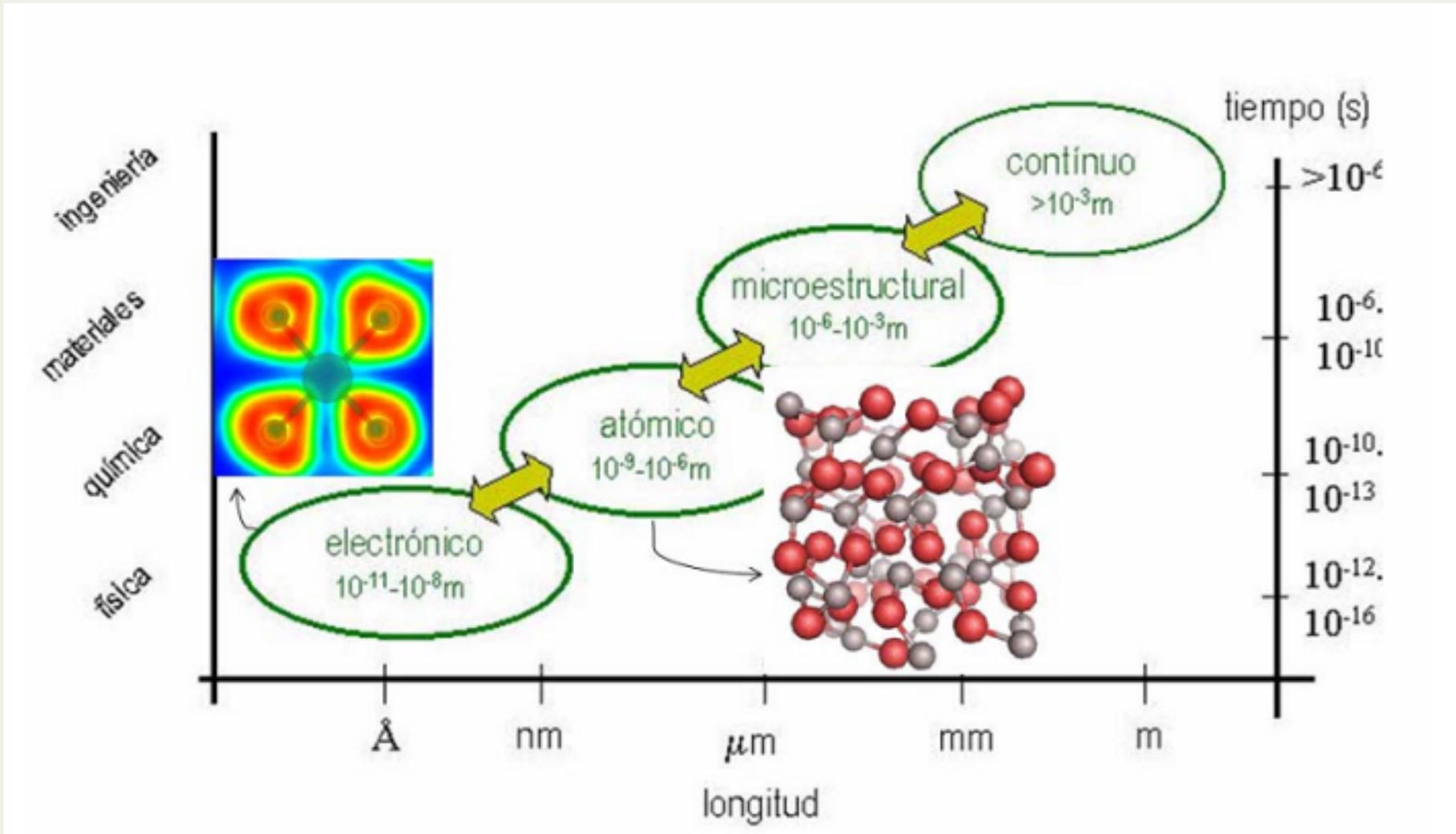
**U Talca, 7 dic. 2012**

# Grupo de NanoMateriales

---

- **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**

# Simulación a nivel atómico



# Plan

---

- Propiedades mecánicas de materiales
- Efecto de impurezas en cobre
- Deformación en vidrios metálicos en base a cobre
- Perspectivas futuras

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

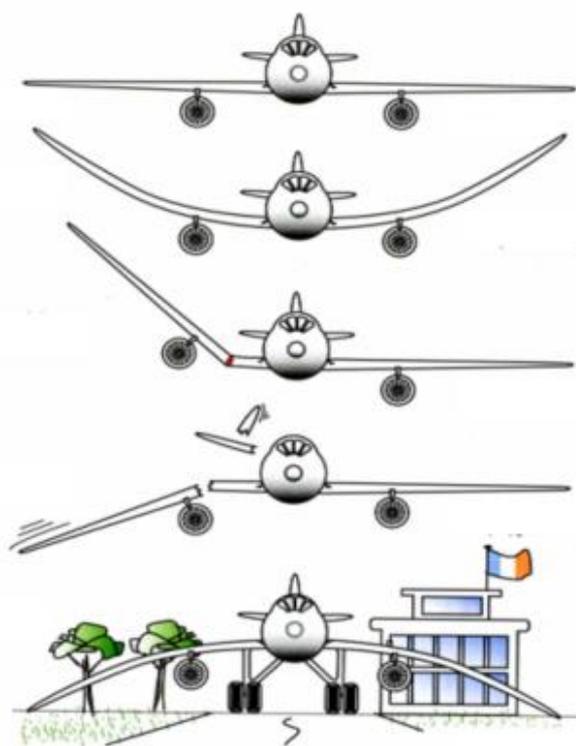
Granta - CES EduPack 2008 ... Aircraft Wing Case Study

Page Outils



## Material Selection for Aircraft Wings

GRANTA



Stiff  
Strong  
Tough  
Light } All OK !

← Not stiff enough (need bigger  $E$ )

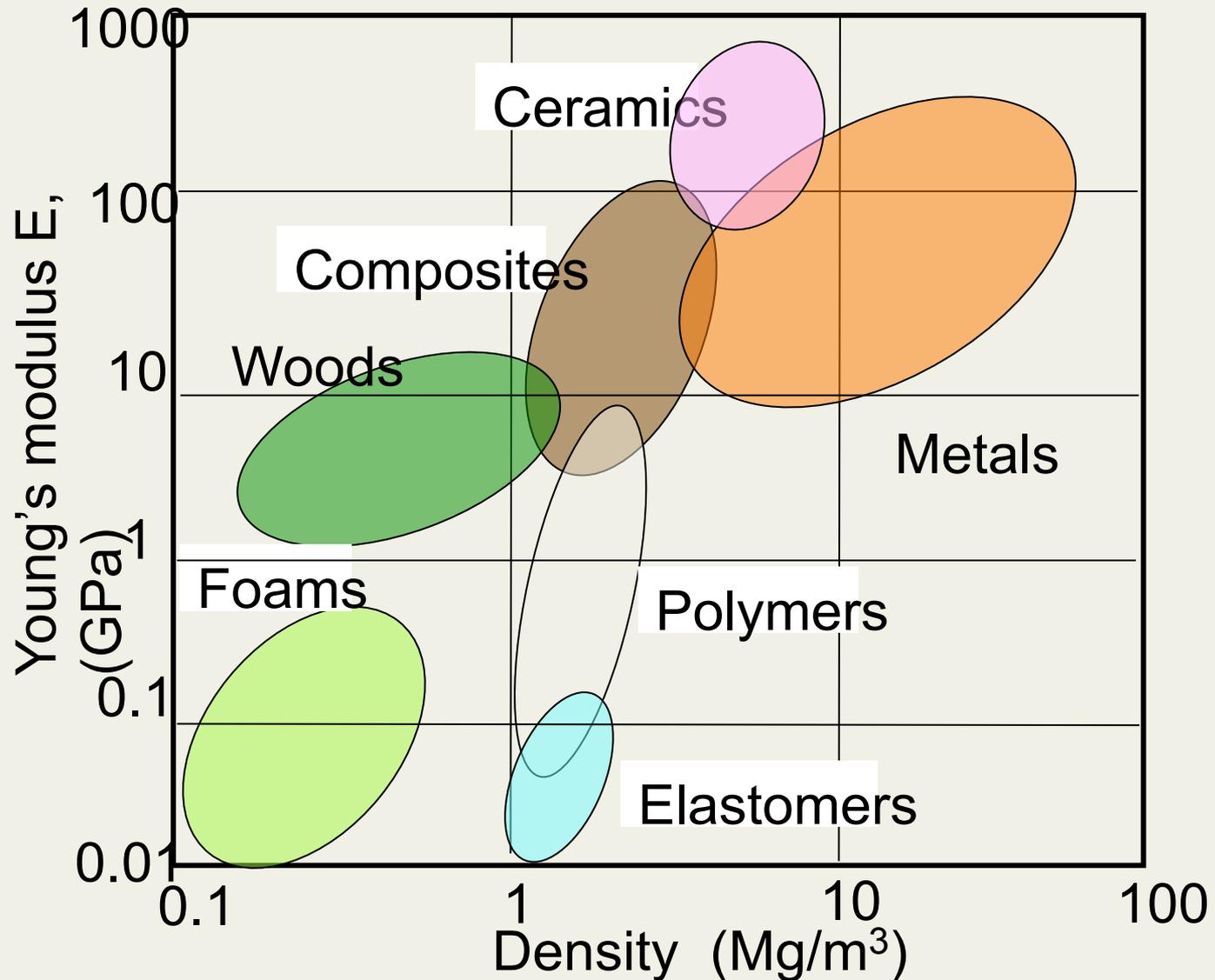
← Not strong enough (need bigger  $\sigma_y$ )

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

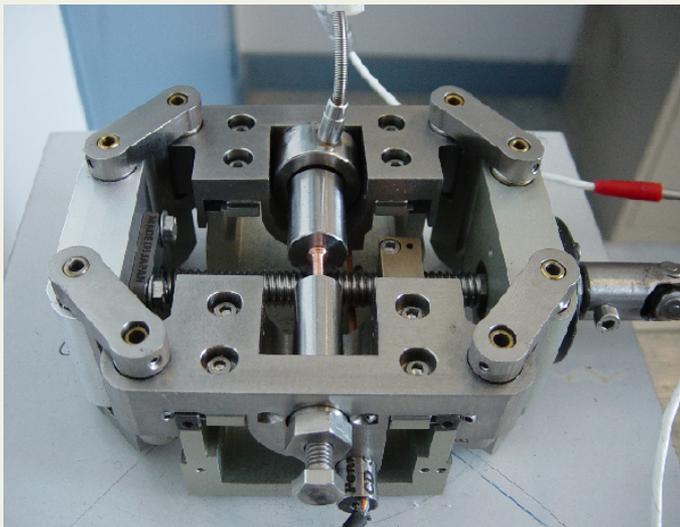
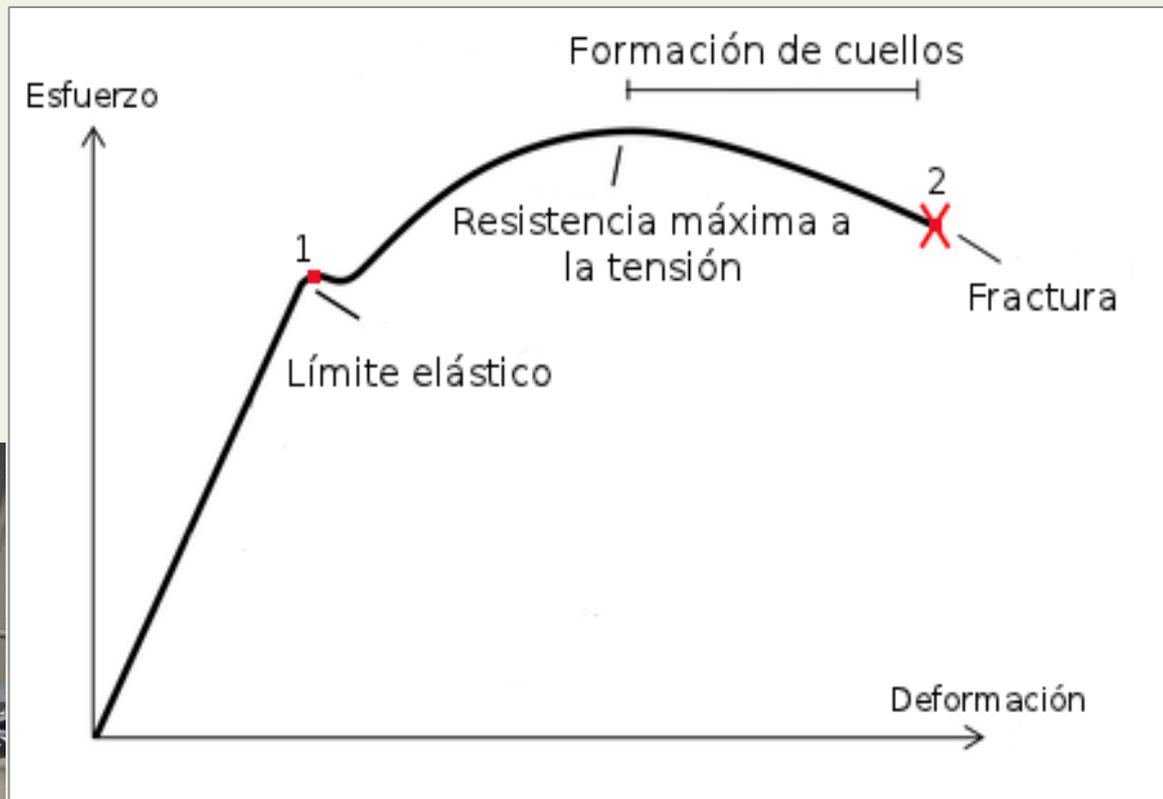
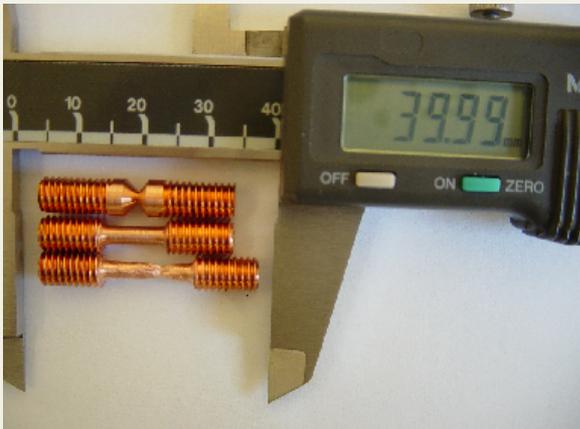
← Too heavy (need lower  $\rho$ )



# Propiedades mecánicas



## Visión “macroscópica”: ensayos mecánicos

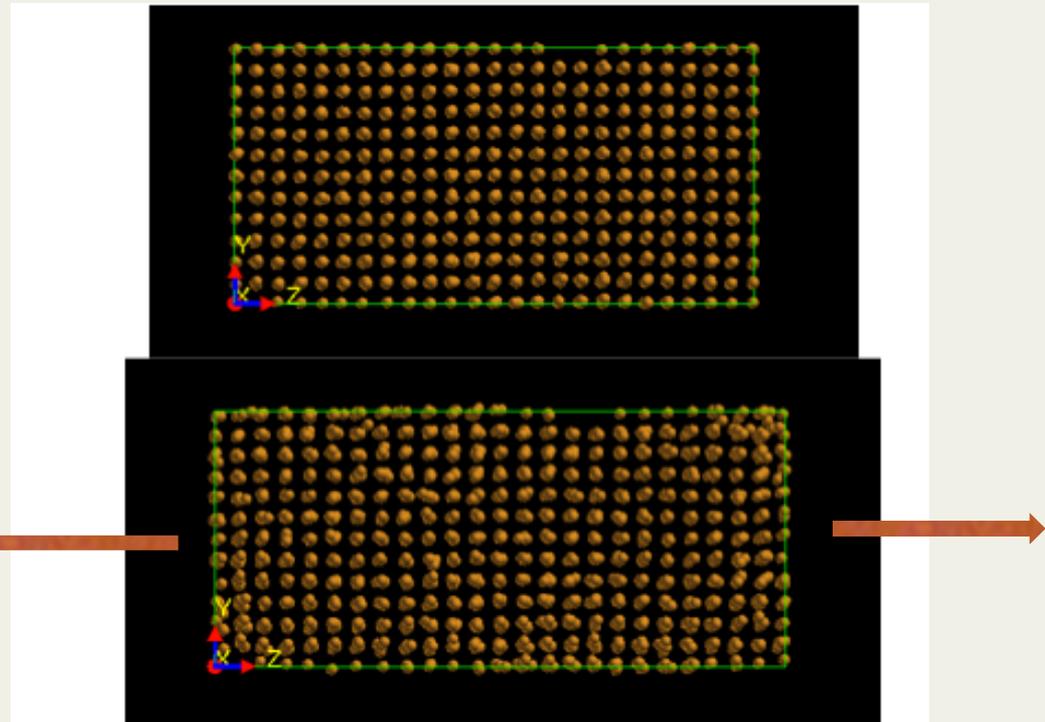


# Clasificación

---

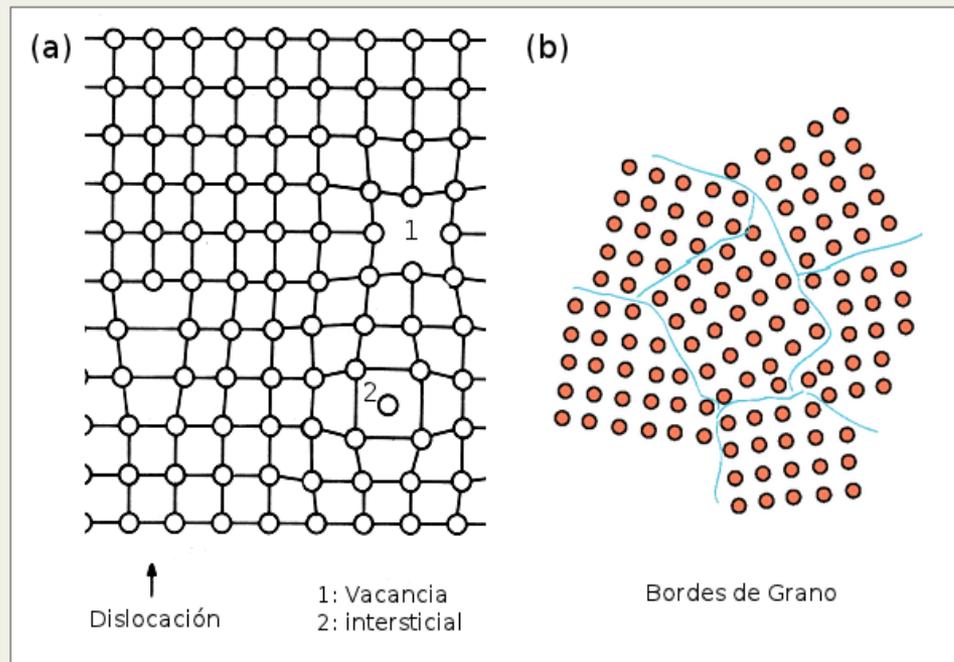
**Régimen elástico:** - constantes elásticas  
- módulos elásticos: Young, Poisson

**Régimen plástico:**  
- deformación homogénea  
- deformación inhomogénea

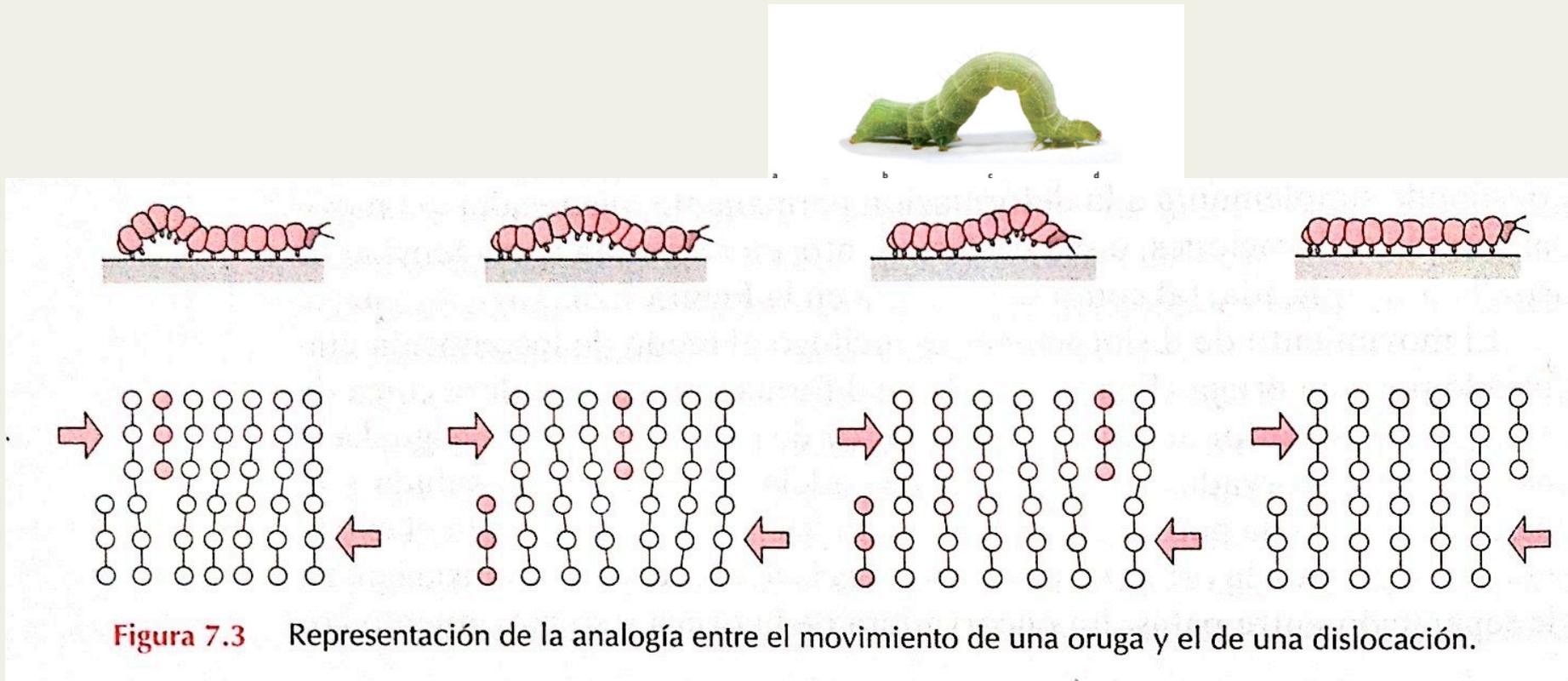


# ¿Que gobierna las propiedades mecánicas?

- 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.

# 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)



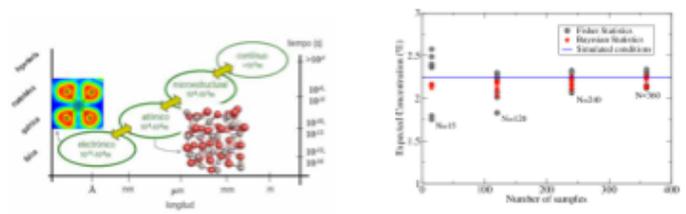
### Álvaro Valencia: Análisis Termodinámico

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



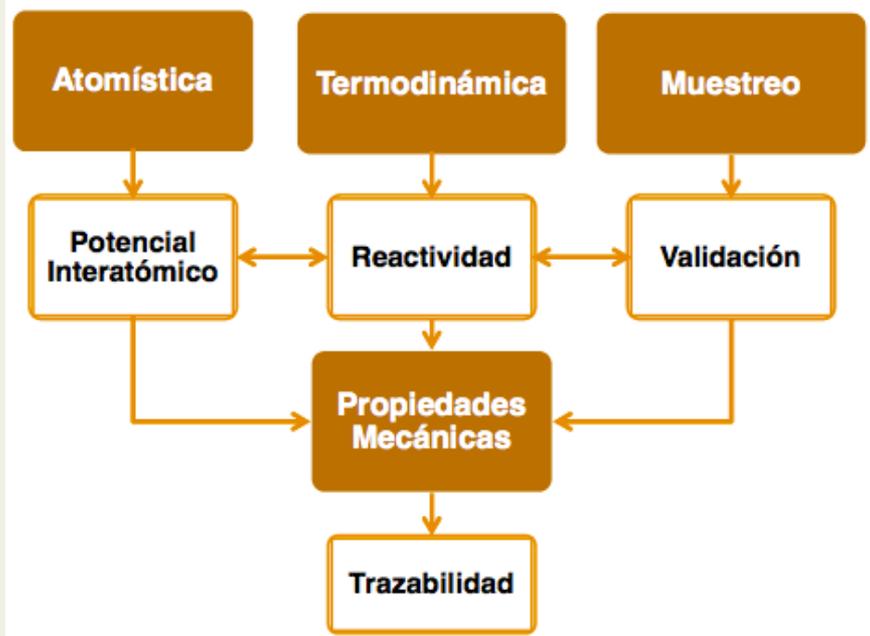
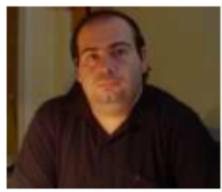
### Gonzalo Gutiérrez: Modelización Atómica

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

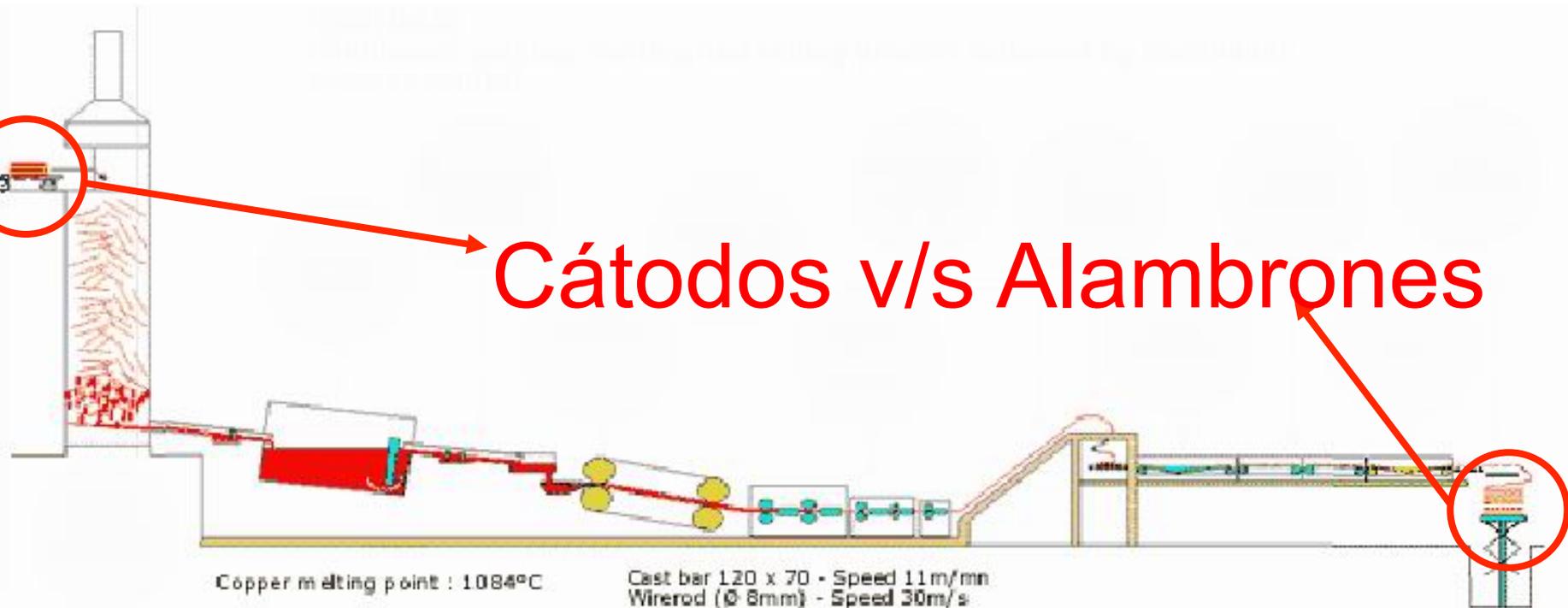


### Sergio Davis: Estadística de Muestreo

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



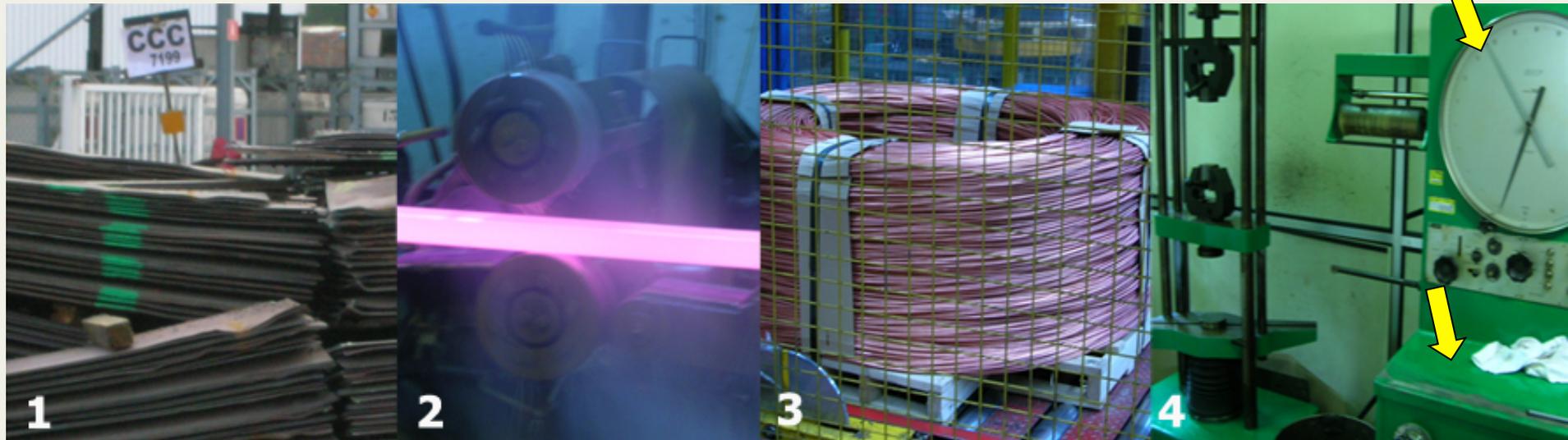
# Cobre “Comercial”: de Cátodos a Alambrones



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

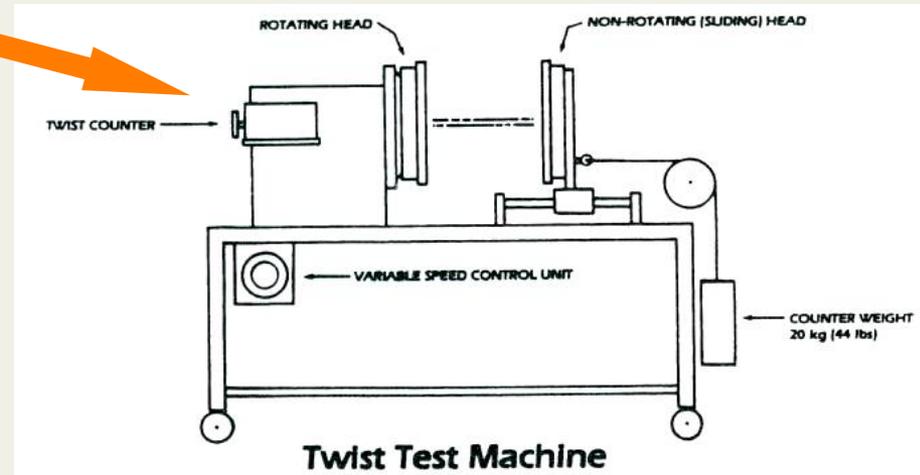
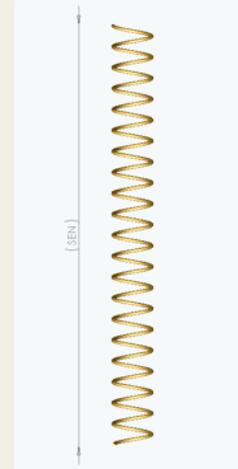
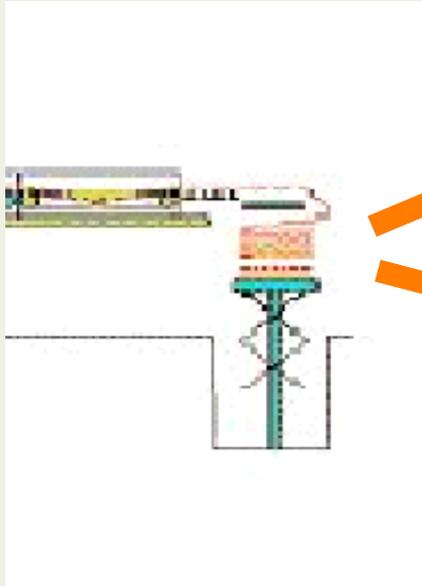
➔ **La “trazabilidad”, correlaciones entre Cobre de lotes de cátodos y los alambrones correspondientes.**

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



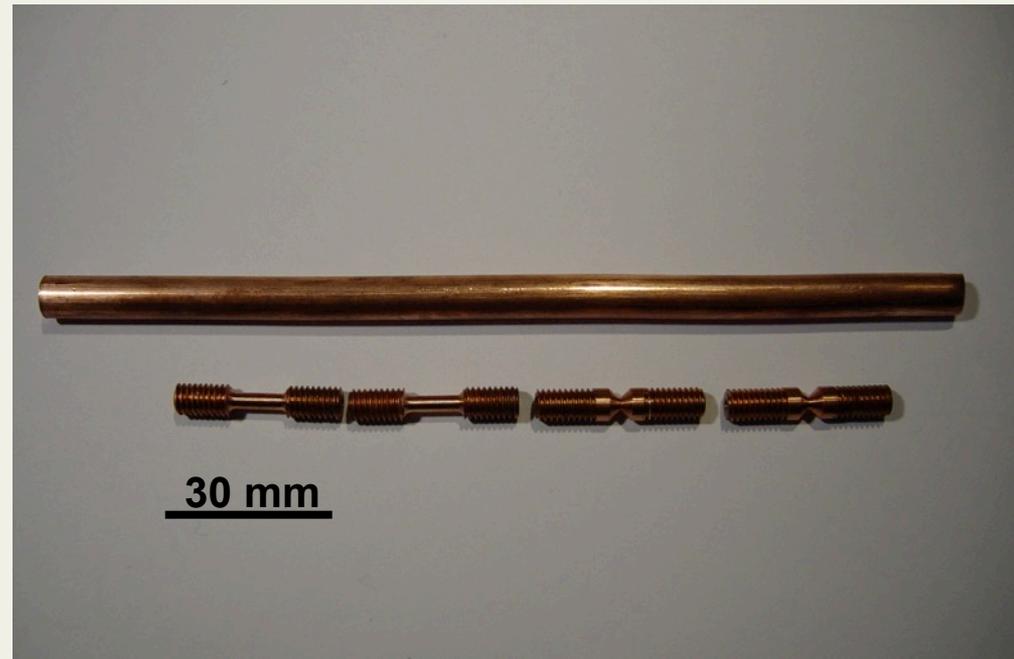
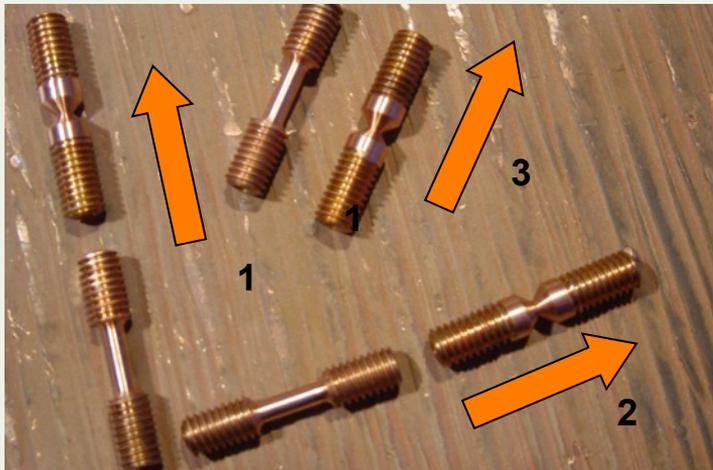
## Antecedentes : ensayos Industriales y calificación.

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

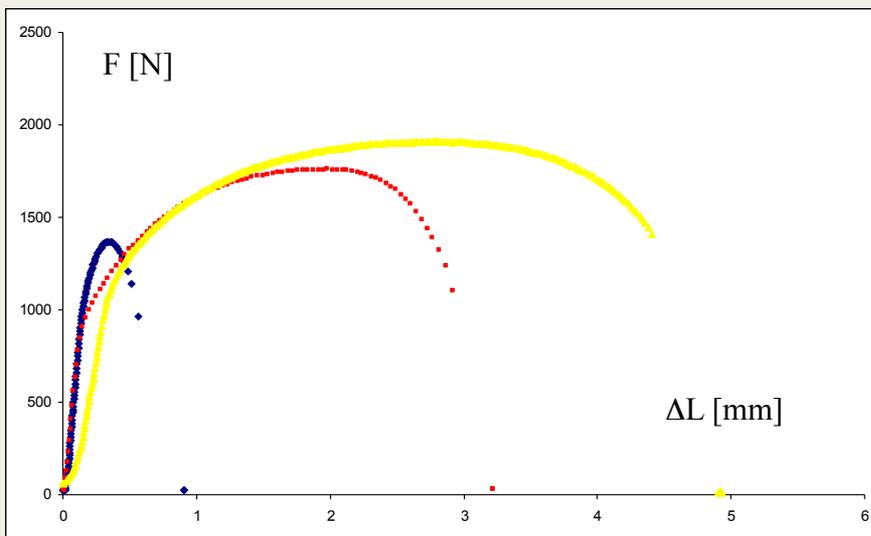
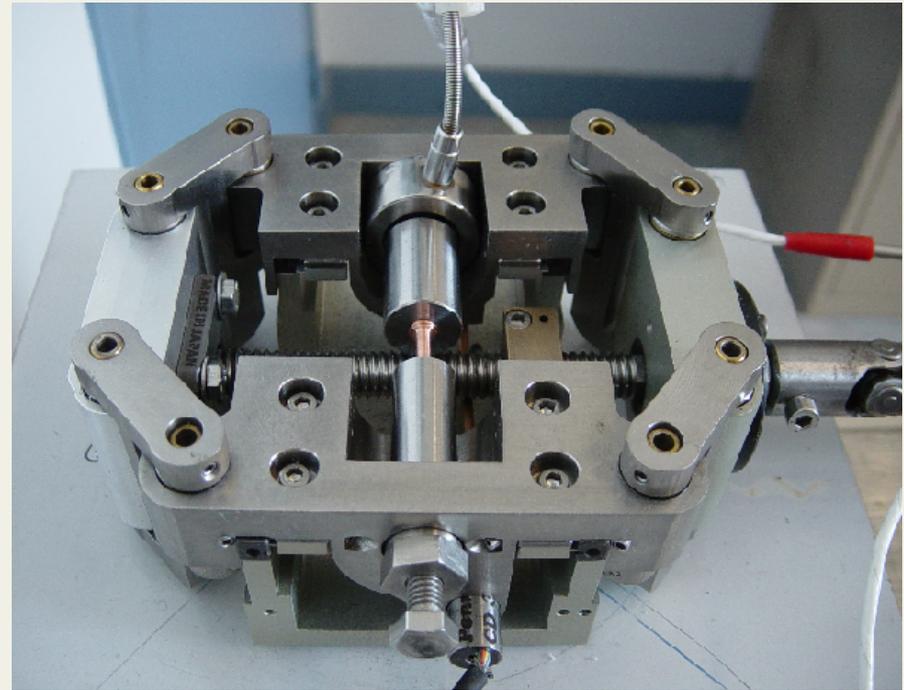
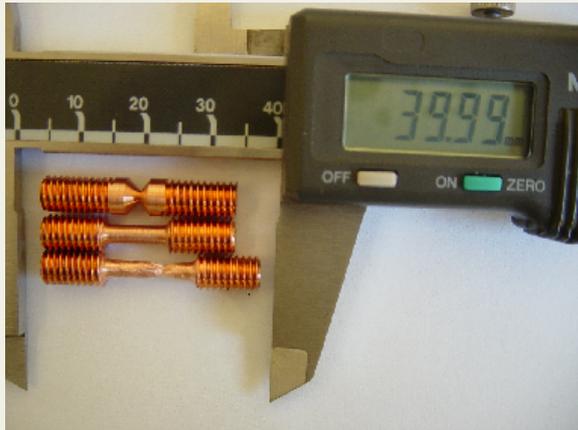


## Metodología experimental: tipo de probetas y ensayos

(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.**

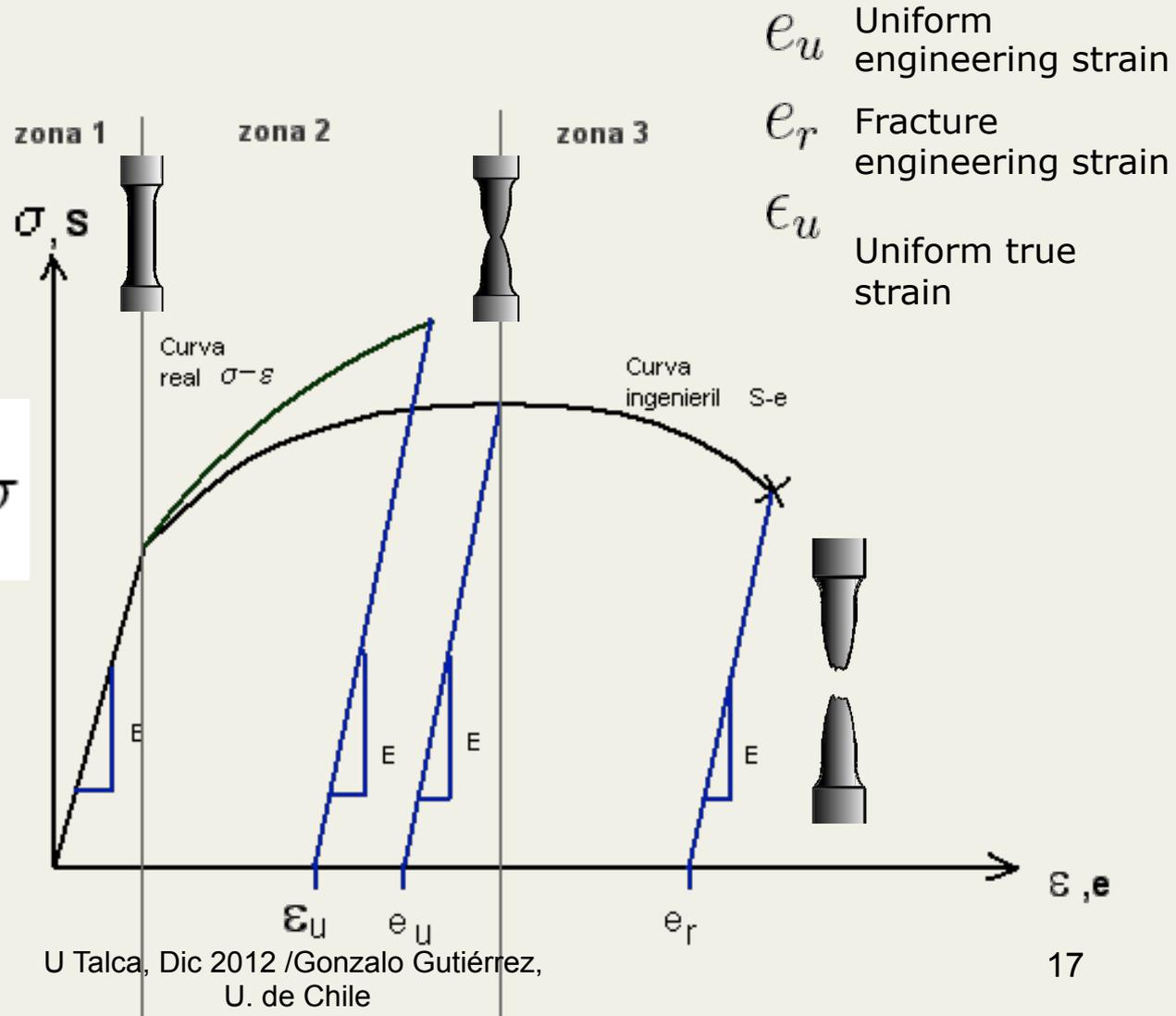
# Análisis de Curvas de Tracción Procedimiento

- 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  $\text{Cu}_2\text{O}$  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

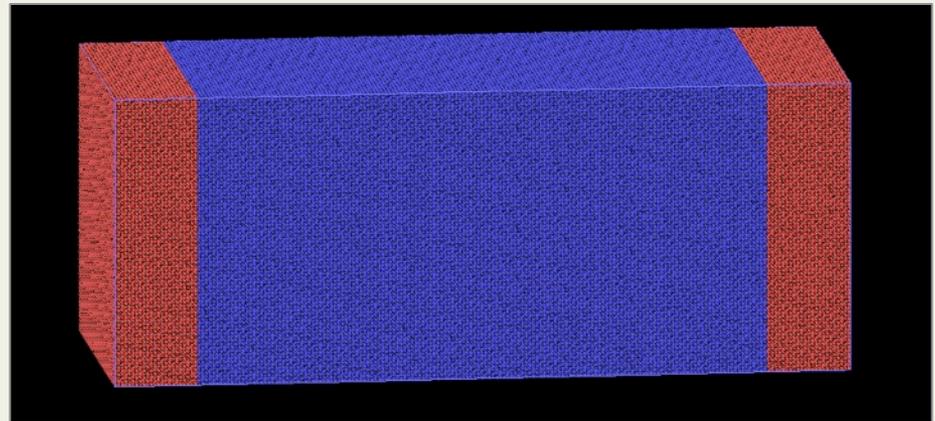
-monocristal

-policristal

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

Datos (valores aproximados):

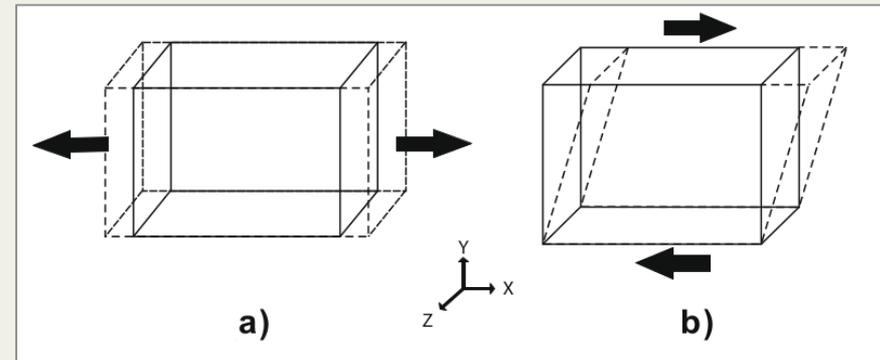
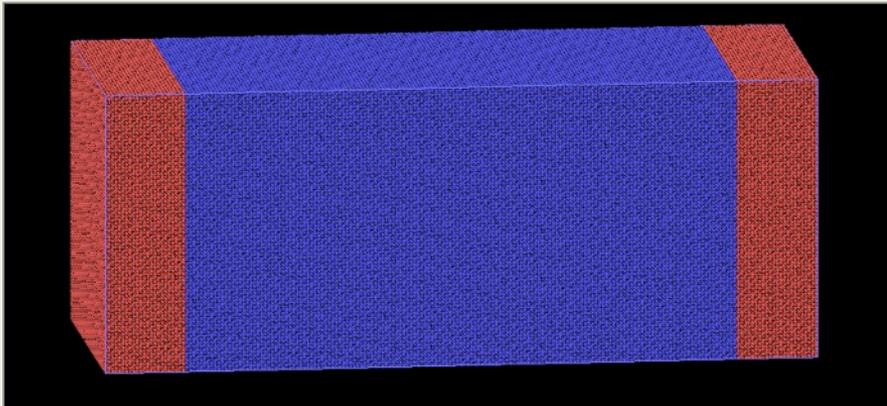
- 660 mil átomos
- 361 [Å] de largo
- 144 [Å] de alto y ancho



# Constantes elásticas

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

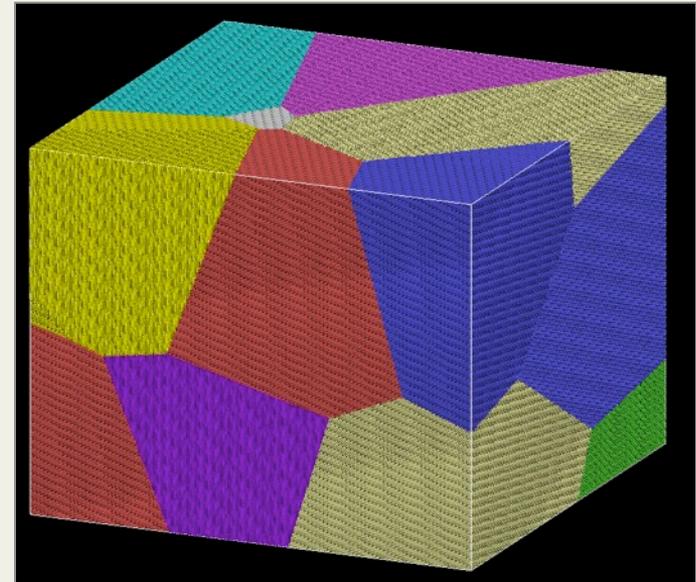
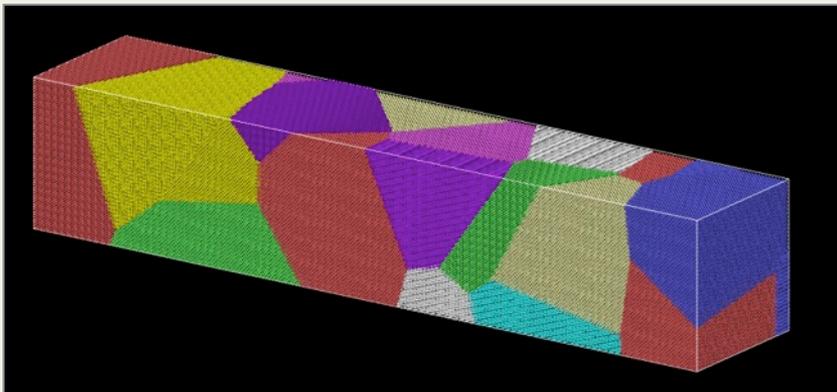
(Elastic properties of the bcc structure of Bismuth at high pressure,, G. Gutiérrez, E. Menéndez-Proupin, and A. K. Singh, Journal of Applied Physics 99, 103504 (2006) )



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

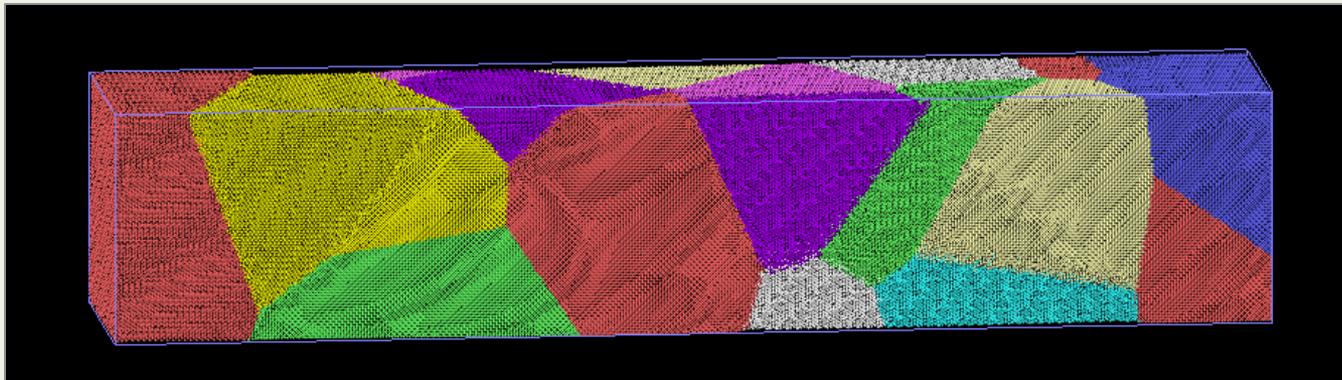


- 20 millones de átomos
- 20 granos
- 614 [Å] de arista

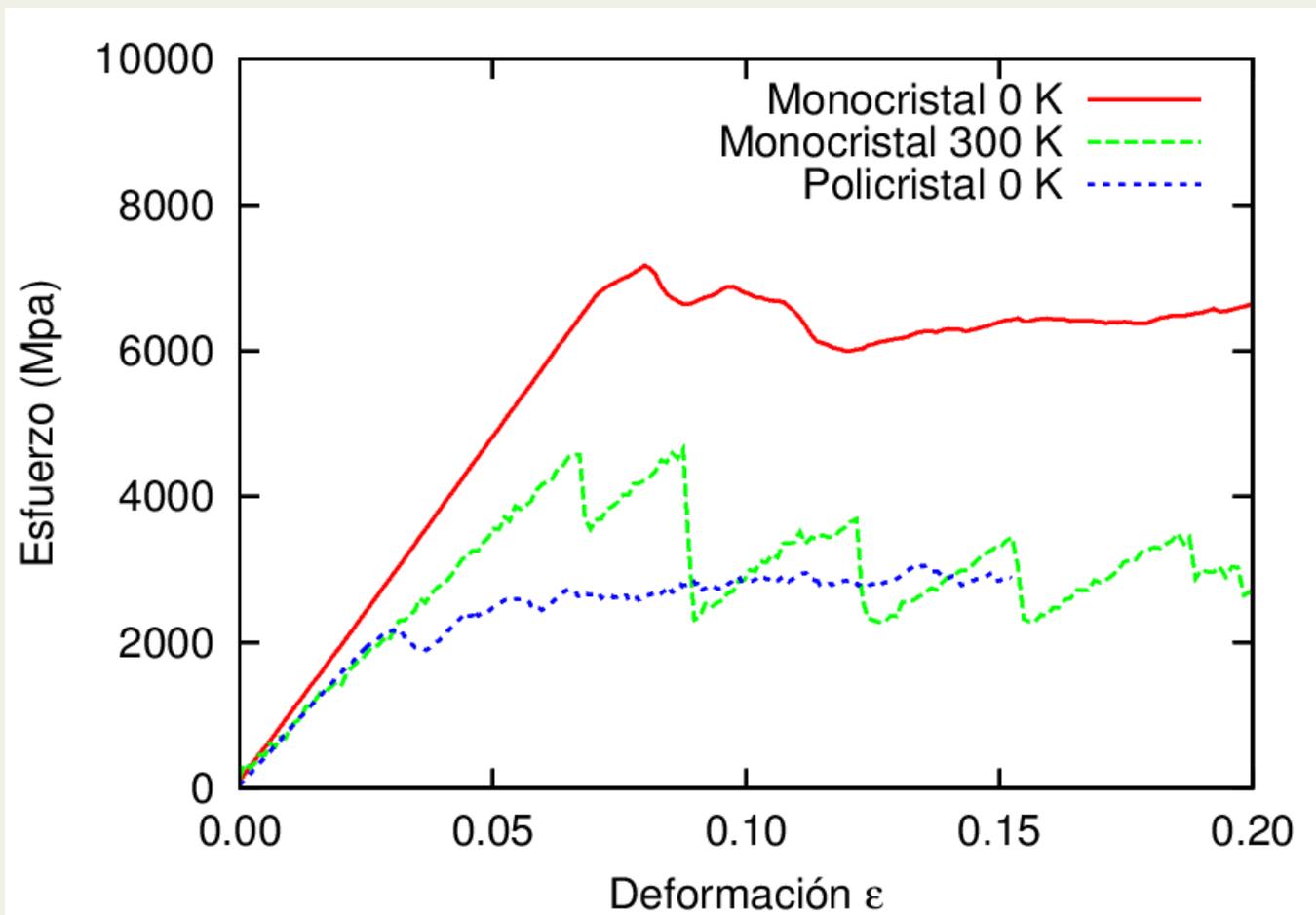
# Poli-cristal

Datos (valores aproximados):

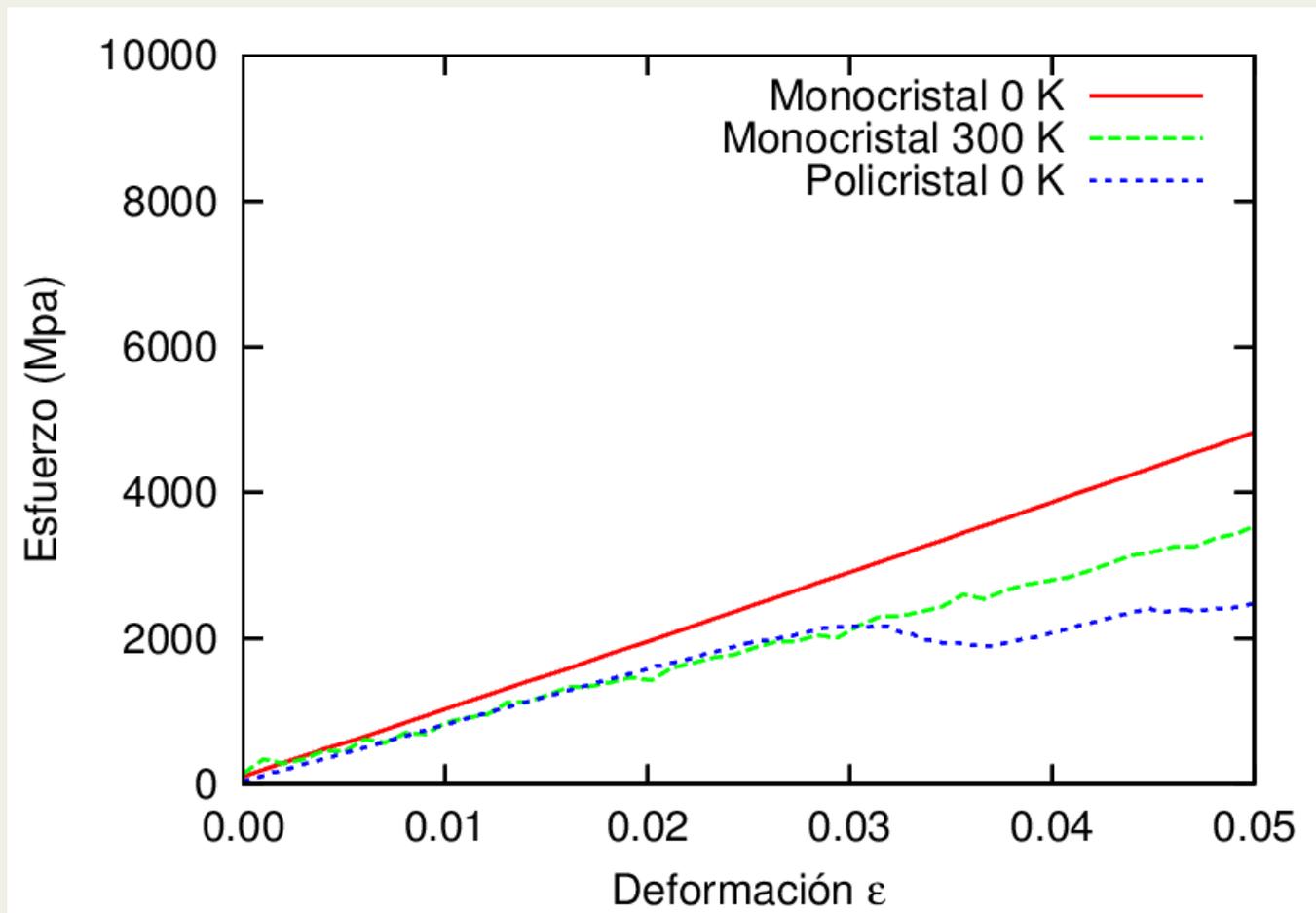
- 1.3 millones de átomos
- 20 granos
- 720 [Å] de largo
- 144 [Å] de alto y ancho



# Ensayos de esfuerzo y deformación

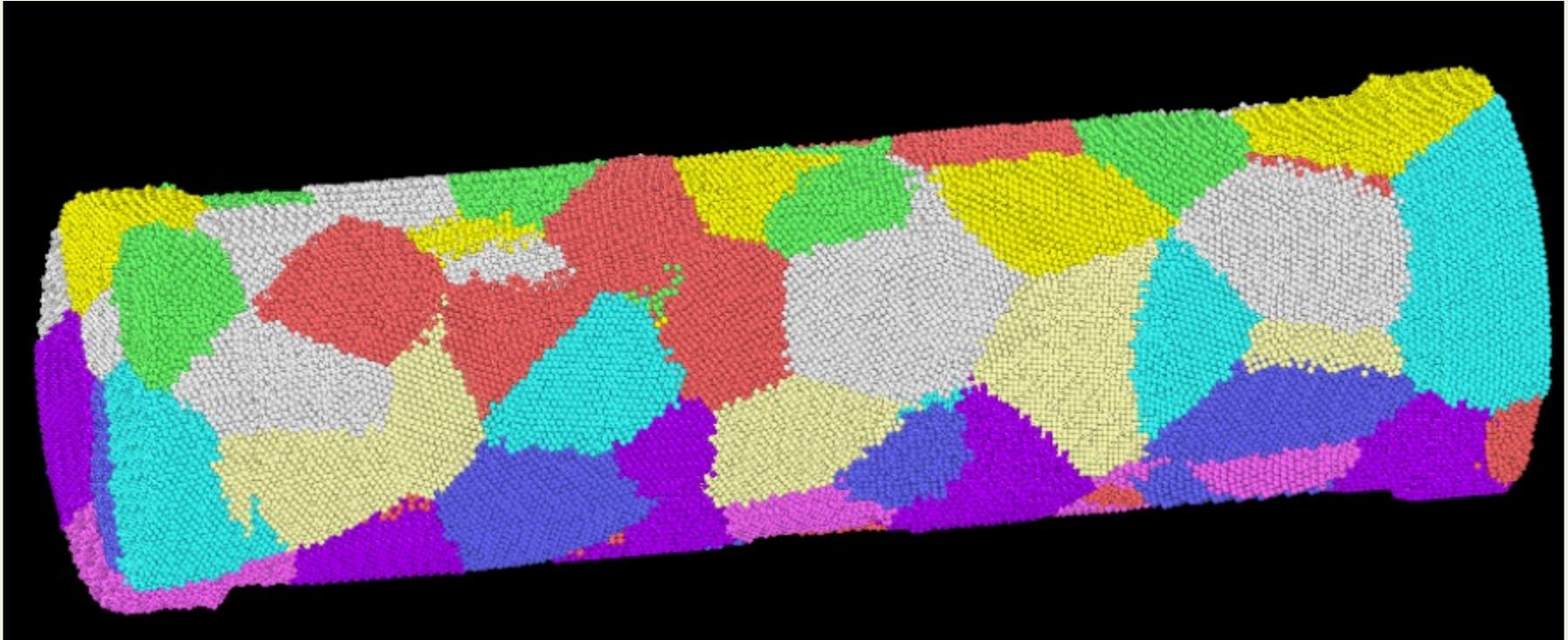


# Detalle a pequeñas deformaciones



# Muestra Cu y Cu-Ag

---



# Sistemas Cu y Cu-Ag

---

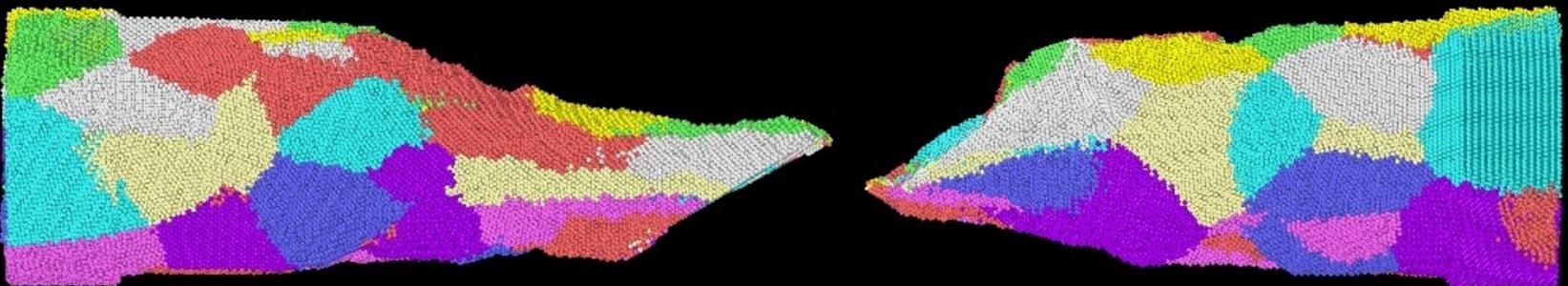
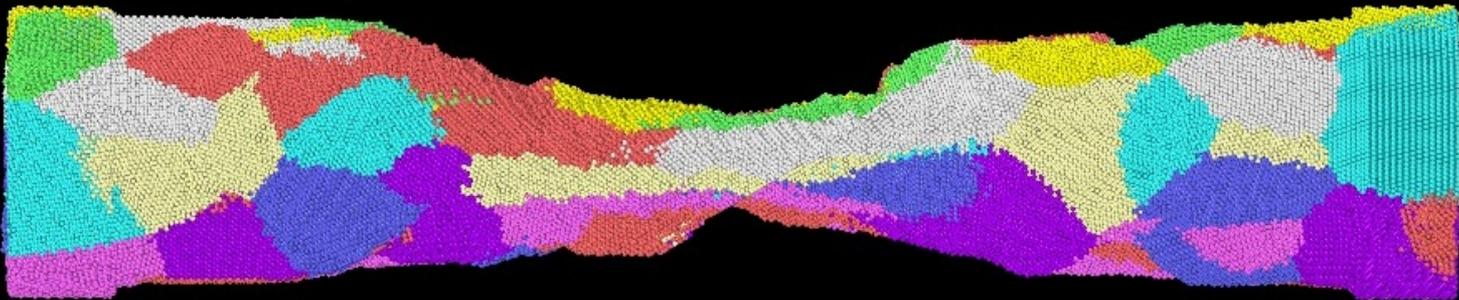
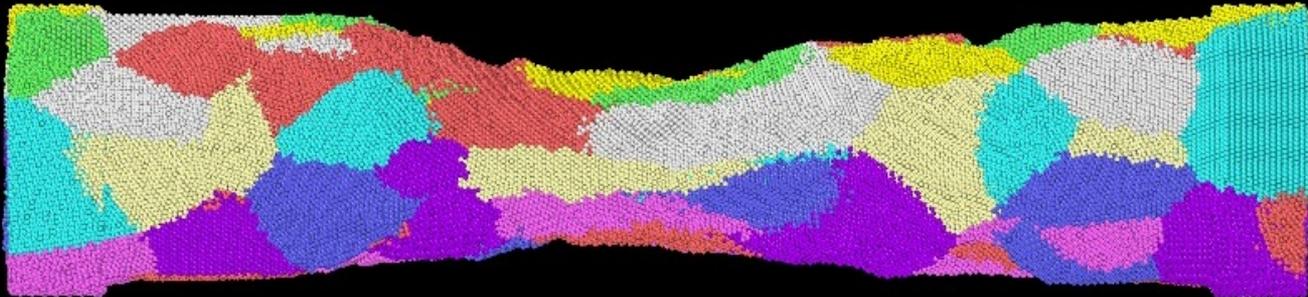
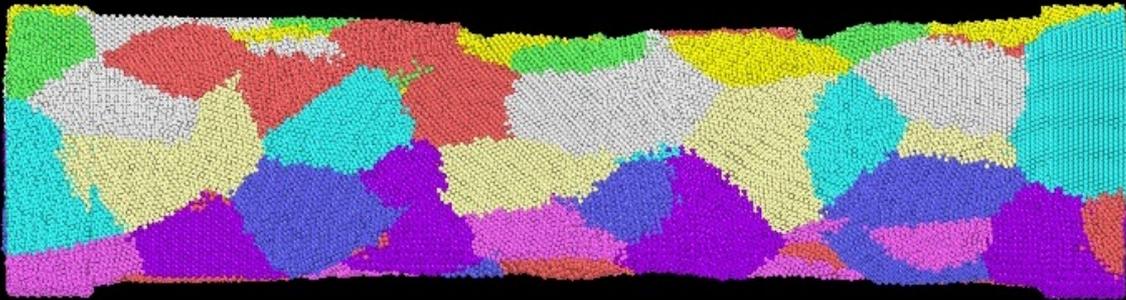
## Sistema 1 Cu puro

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

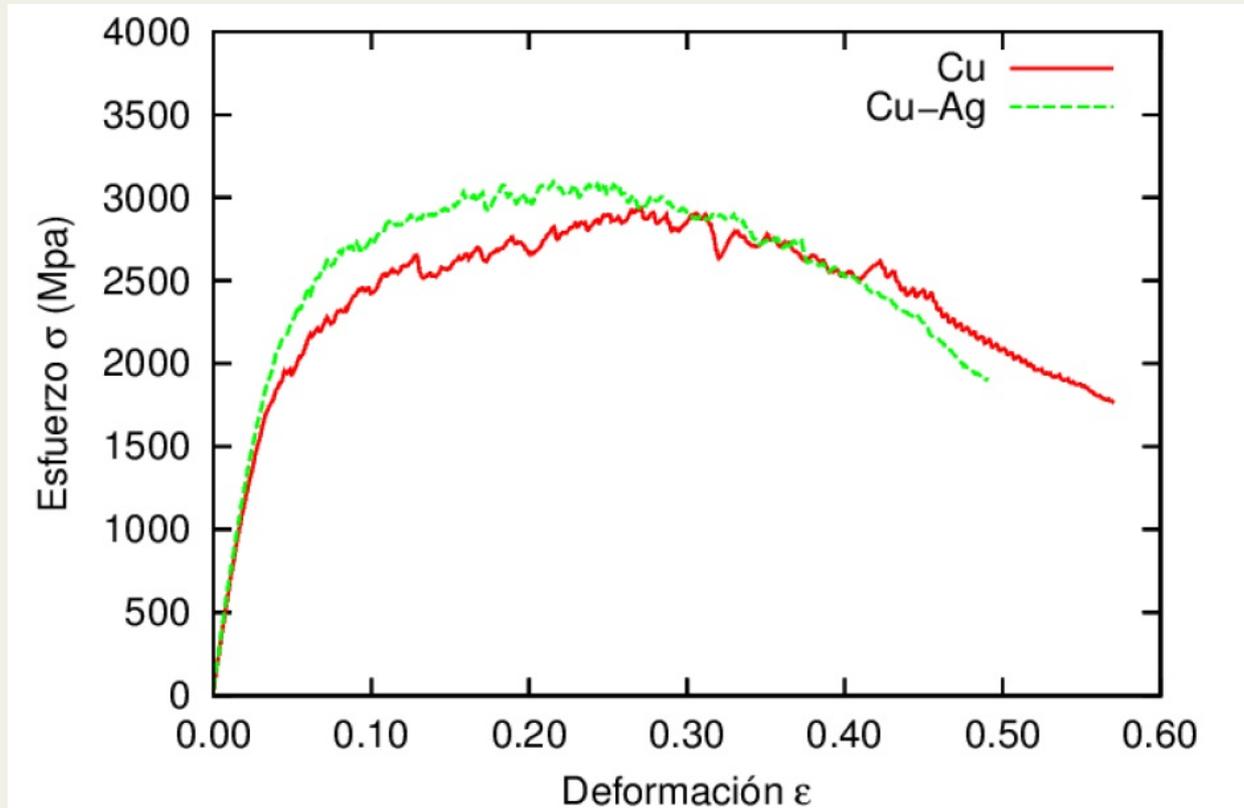
## Sistema 2 Cu-Ag

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

# Animación



# Curva esfuerzo-deformación



Composición	E [GPa]	$\sigma_{elas}$ [MPa]	$\sigma_{ult}$ [MPa]	$\sigma_f$ [MPa]	$\epsilon_f$
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 Cu<sub>46</sub>Zr<sub>54</sub> 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.

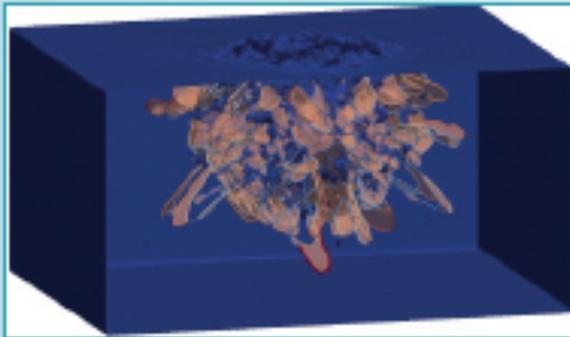
Surge la idea de modelar este proceso de impacto para entender la deformación del vidrio metálico sometido a altas velocidades de deformación.

Experimentos Convencionales (Tracción y compresión) se realizan a bajas velocidades de deformación, del orden de  $1 \times 10^{-4}$  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  $1 \times 10^4$  a  $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ .

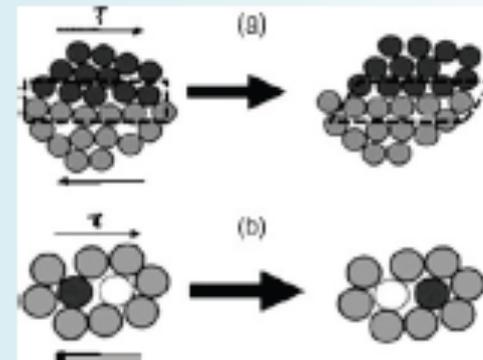
# Propiedades Mecánicas de Vidrios Metálicos

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

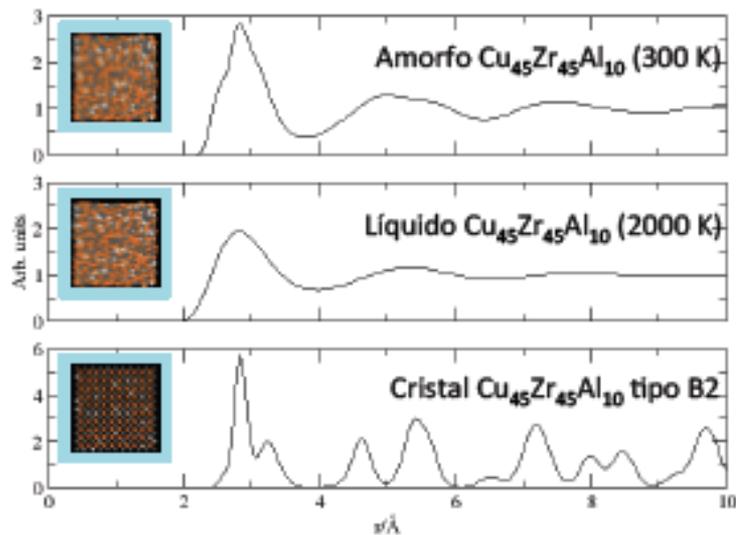
# Impacto entre proyectil y blanco de vidrio metálico

## Metodología

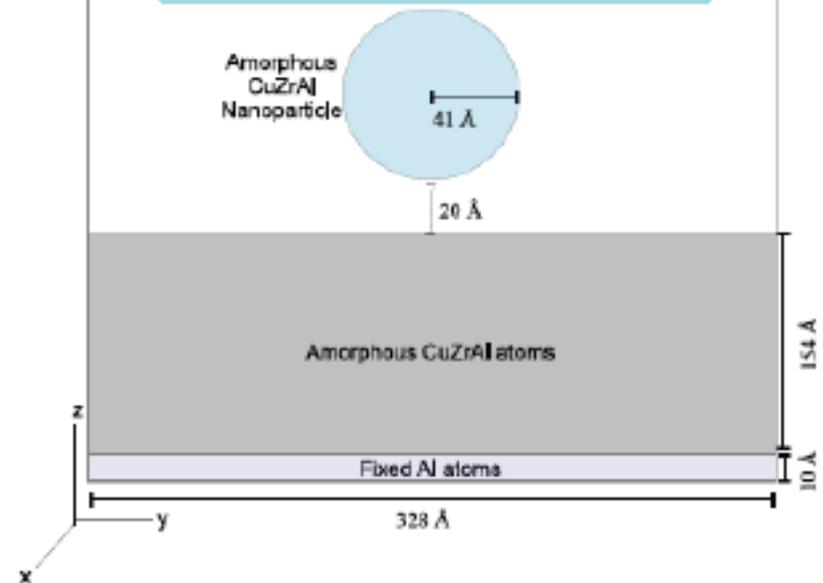
- 1.-Se generaron muestras de vidrio metálico de la aleación  $\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{45}\text{Al}_{10}$ , mediante calentamiento y enfriamiento rápido de un modelo de  $\text{CuZrAl}$  cristalino tipo B2.
- 2.-Analizamos las muestras con herramientas de diagnóstico como la función de distribución 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

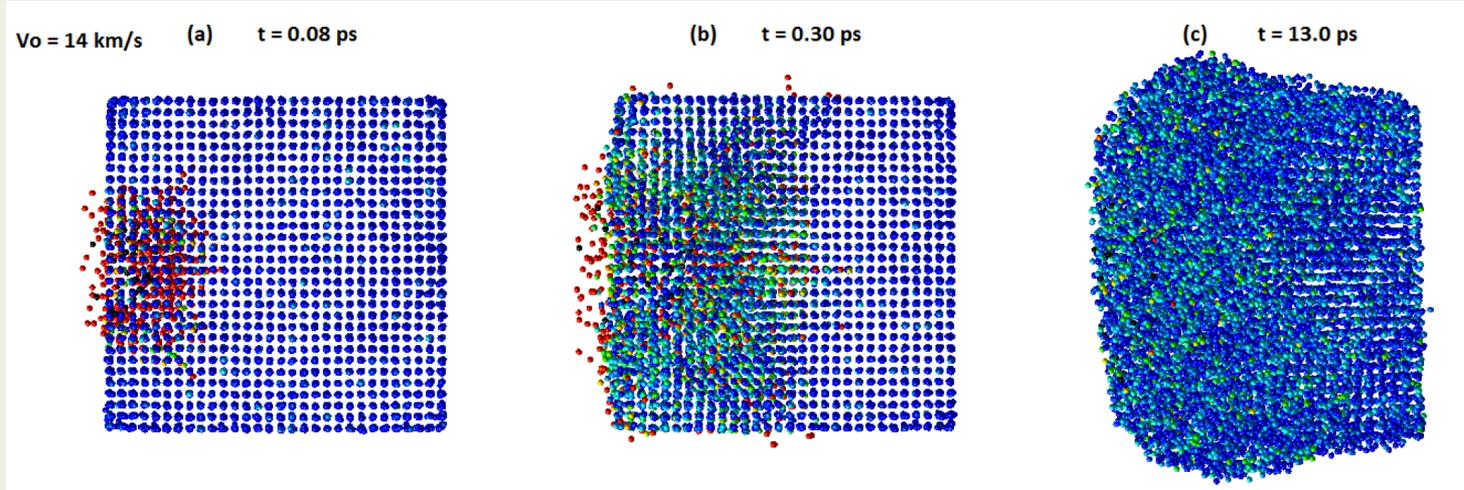
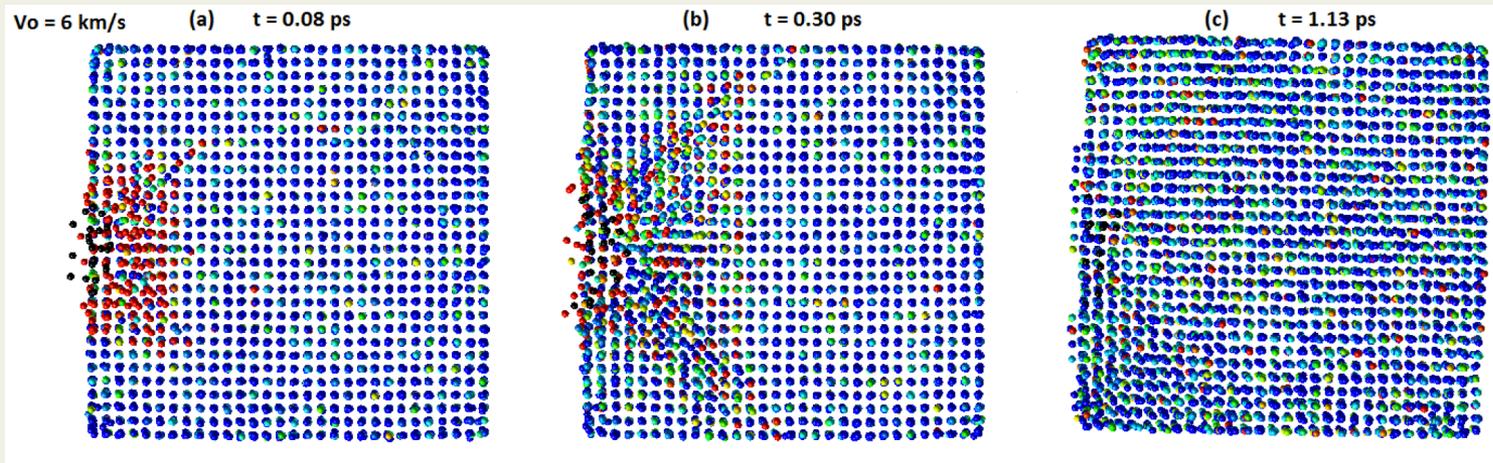


Configuración inicial del impacto.

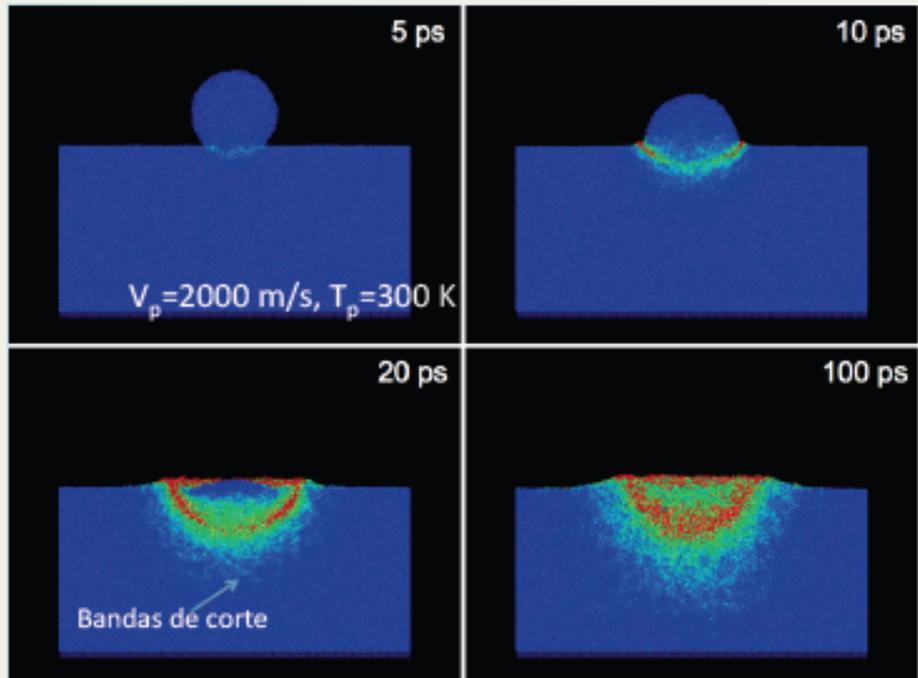
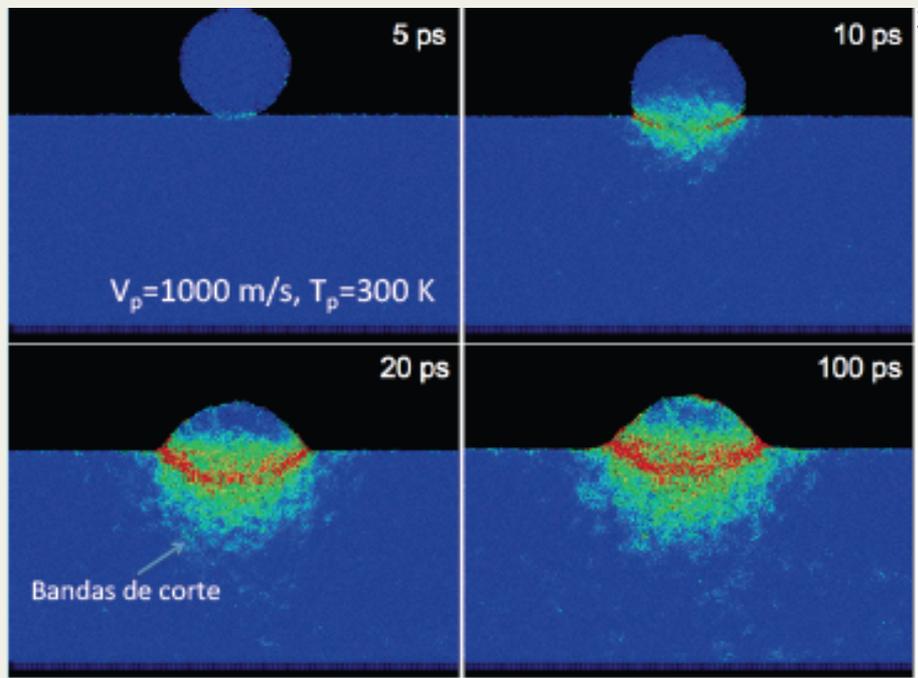
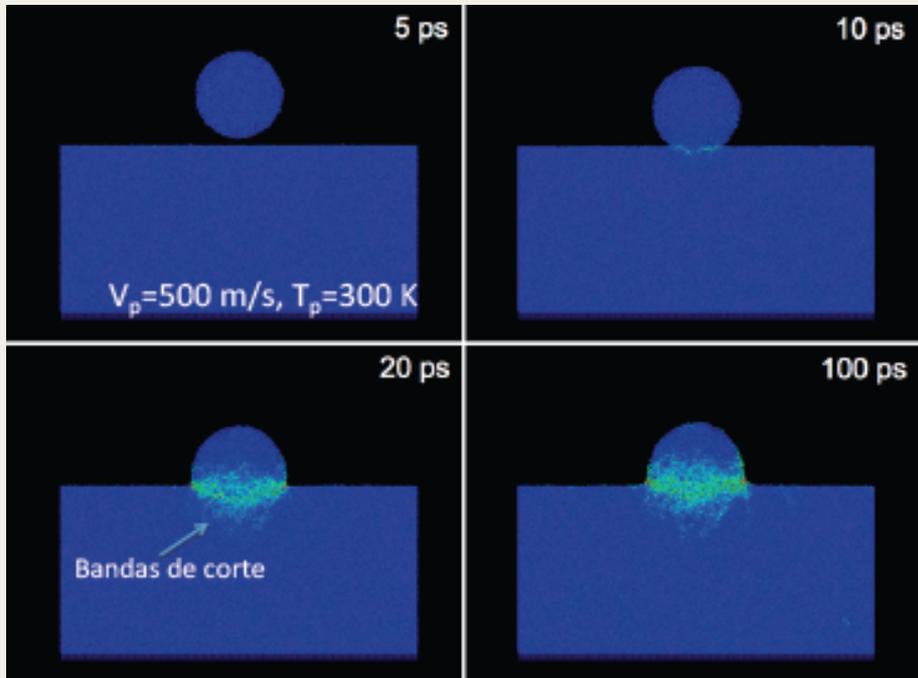


# ¿Qué ocurre en el impacto de proyectiles en medios amorfos?

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  
Materials, FCFM, U 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

---

Ir a millones de átomos. Caracterizar el régimen plástico

Caracterizar dislocaciones y fractura. Relacionar con Comportamiento macroscópico.

Relacionar con lo que ocurre a nivel atómico: estructura electrónica de los bordes de grano.

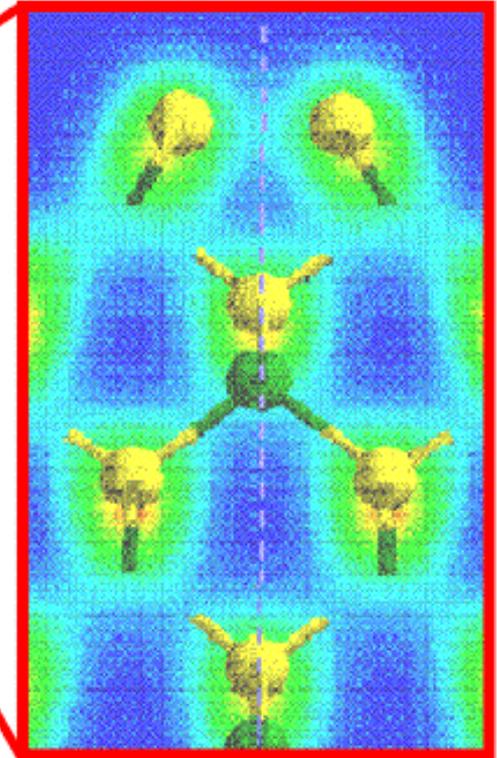
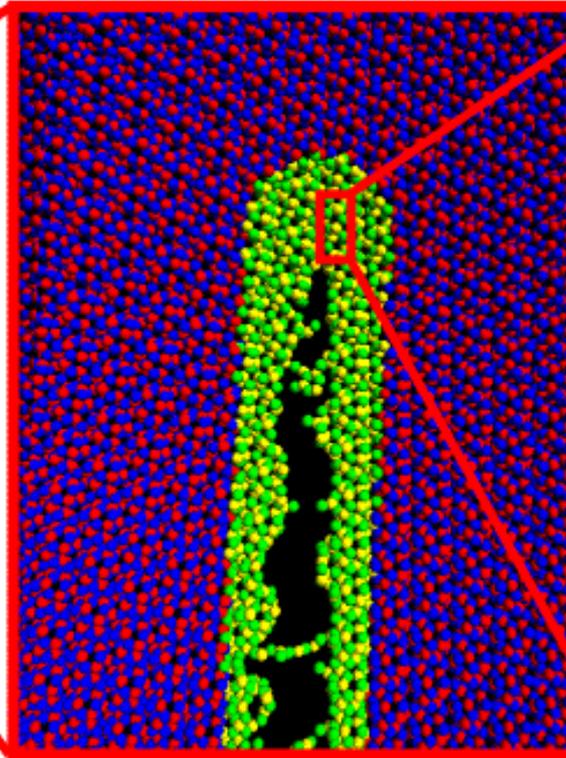
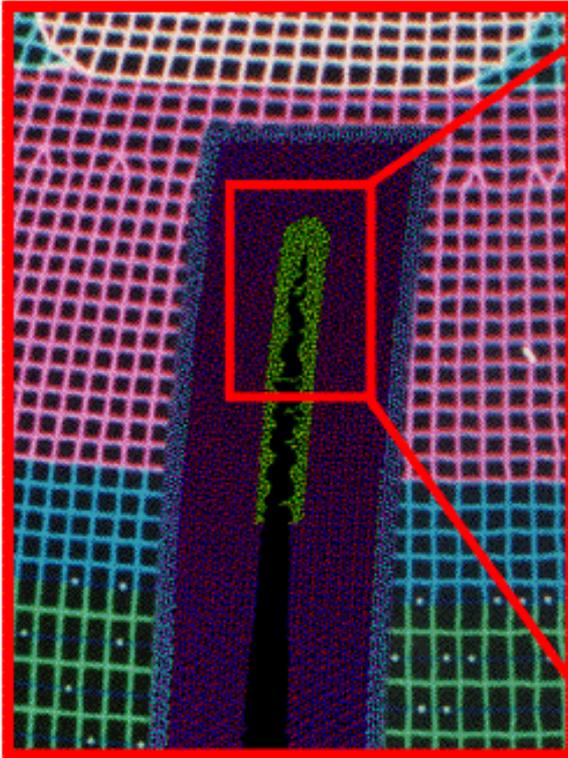
Simulación multiescala

# 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)

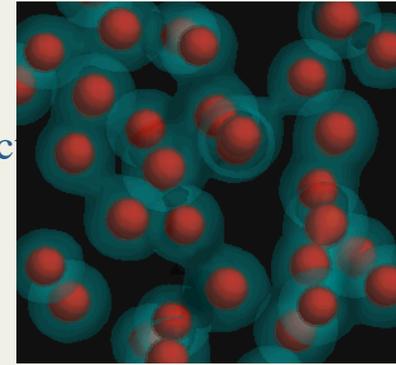
# Metodologías

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

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

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

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

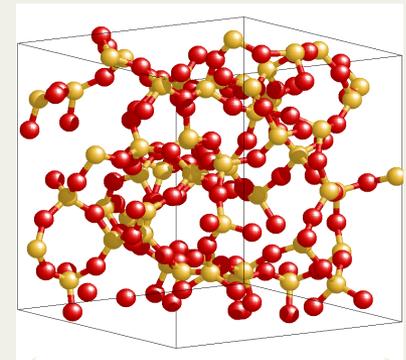


$10^{-11}$ - $10^{-8}$ m

- **Dinámica Molecular**

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

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



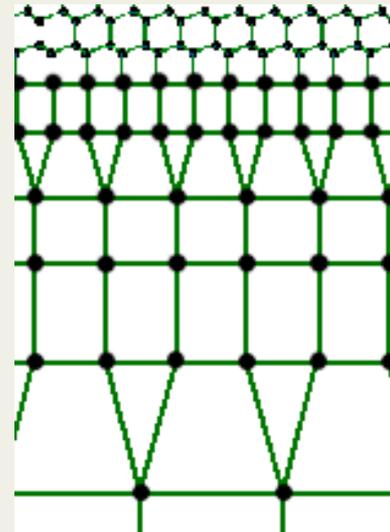
$10^{-9}$ - $10^{-6}$ m

**Ensembles; funciones correlación**

- **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

# GNM: Areas de investigación

## Fundamentos de la mecánica estadística:

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

## 2. Física de Materiales

- a) Vidrios: propiedades estructurales, dinámicas y mecánicas
- b) Materiales nucleares: daño por radiación
- 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) nanoestructuras: nanotubos

## 3. Técnicas de simulación computacional

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