



Impactos a hipervelocidad: simulación por medio de dinámica molecular

Claudia Loyola
Gonzalo Gutiérrez



Grupo de NanoMateriales <http://www.gnm.cl>,
Departamento de Física,
Facultad de Ciencias,
Universidad de Chile.

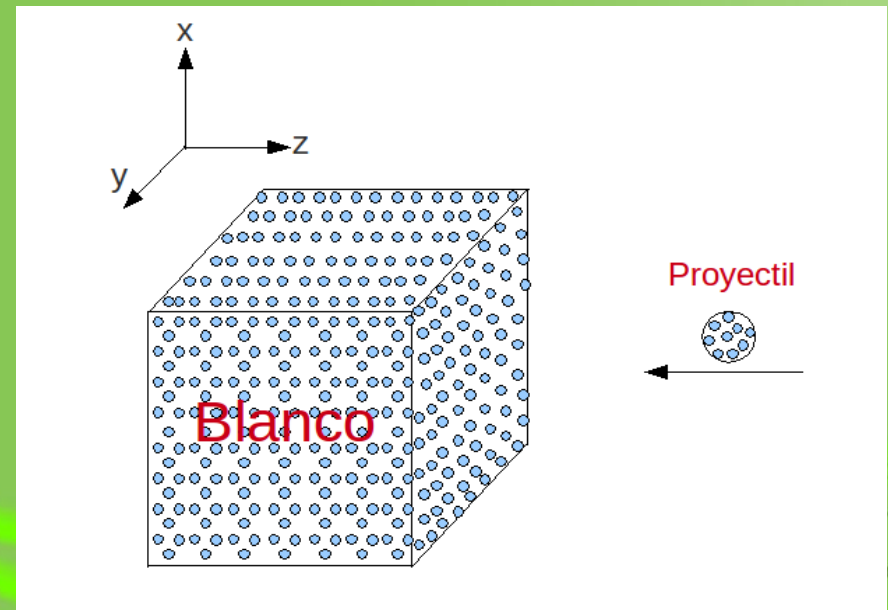
Esquema

I. Introducción

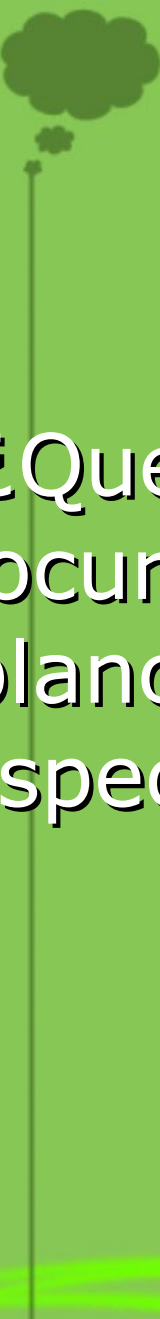
- Impactos alta velocidad
- Simulación computacional

II. Resultados simulaciones de impacto de proyectiles a altas velocidades sobre un blanco de cobre.

III. Conclusiones.







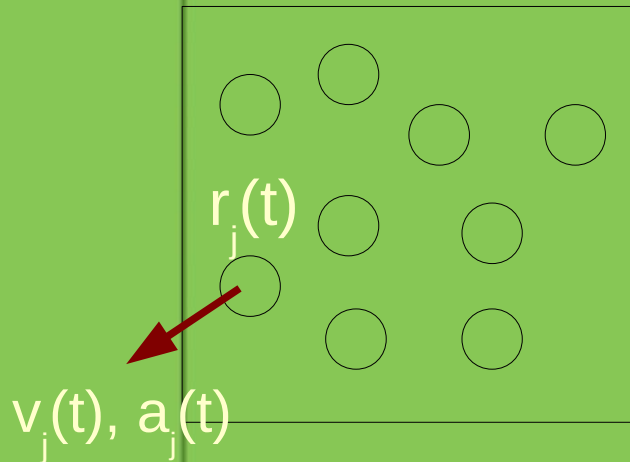
¿Qué le
ocurre
al blanco con
respecto a

- masa
- velocidad
- dureza
- tamaño
- superficie
de contacto
-

del proyectil?

Dinámica Molecular

N partículas



$$m \frac{d^2 r_j}{dt^2} = -\nabla_{r_j} U(r_j) \quad j=1..N$$

sistema acoplado de N-cuerpos:
solución numérica

Ensemble microcanónico

$$E = K + U$$

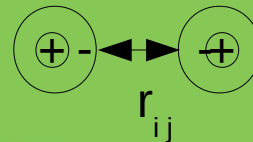
$$K = \frac{1}{2} m \sum_{j=1}^N v_j^2$$

$$U = U(r_j)$$

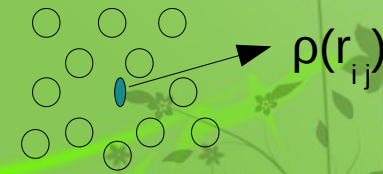
Potencial de Sutton-Chen

$$\phi = \varepsilon \left\{ \sum_{i=1} \sum_{j=i+1} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^n - c \sum_{i=1} \left[\sum_{j=1, j \neq i} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m \right]^{1/2} \right\}$$

Término repulsivo
Potencial de pares

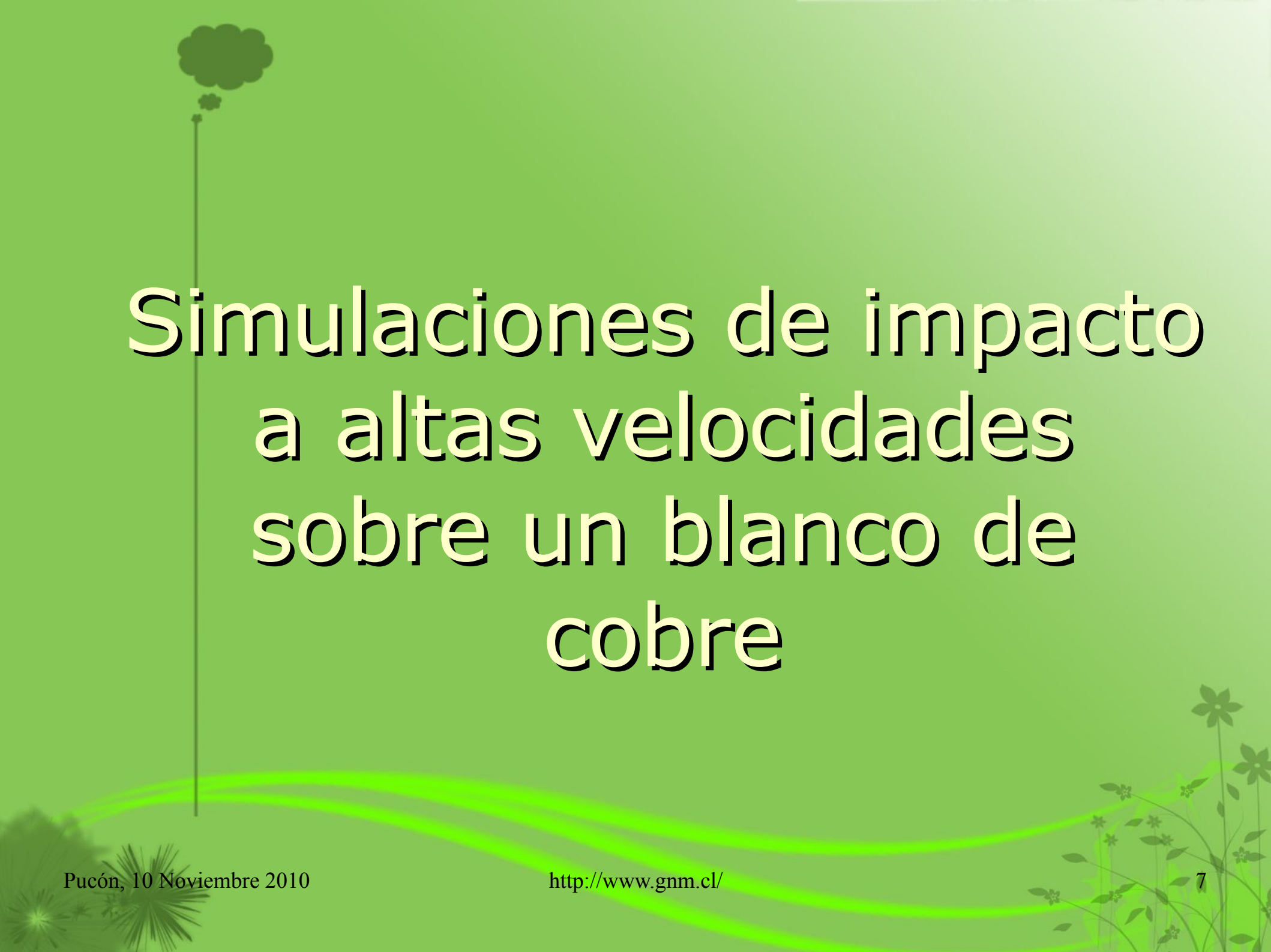


Término atractivo
Potencial de muchos
cuerpos



Esquema de la Dinámica Molecular





Simulaciones de impacto a altas velocidades sobre un blanco de cobre

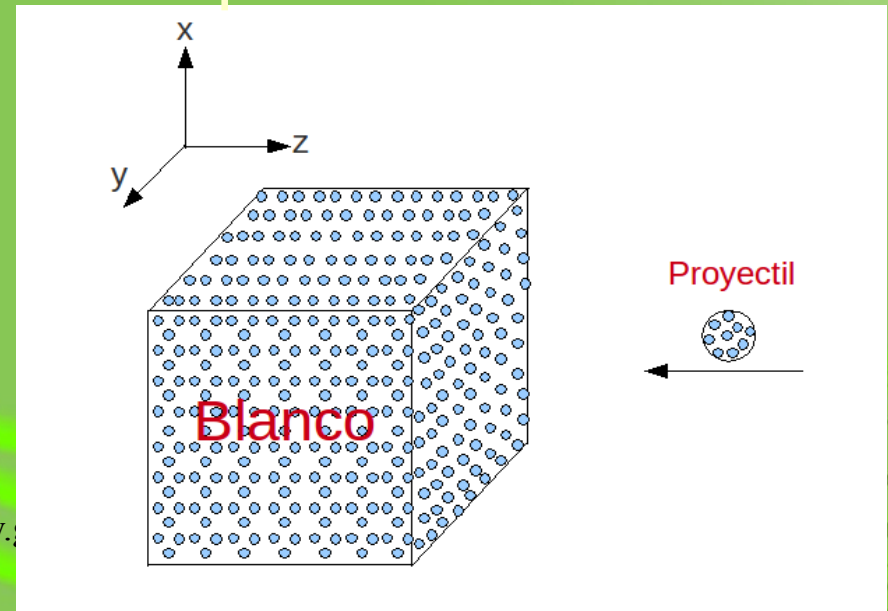
Se realizaron dos tipos de impacto

1. Proyectil con velocidad constante durante toda la simulación.
 - 1.5 Km/s
 - 5.0 Km/s
2. Proyectil con sólo velocidad inicial de 5.0 Km/s

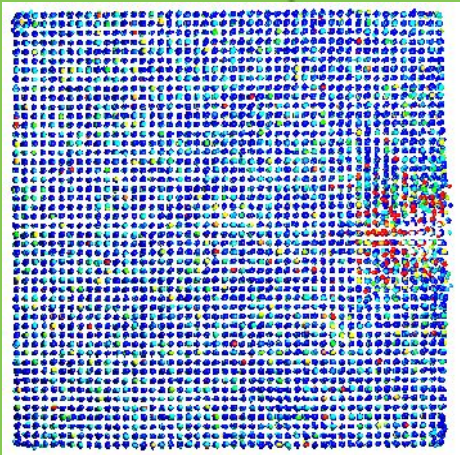
$a=b=198.55 \text{ \AA}$ y $c=249.09 \text{ \AA}$
55296 átomos de cobre
47 at. Cu

$T=300 \text{ K}$

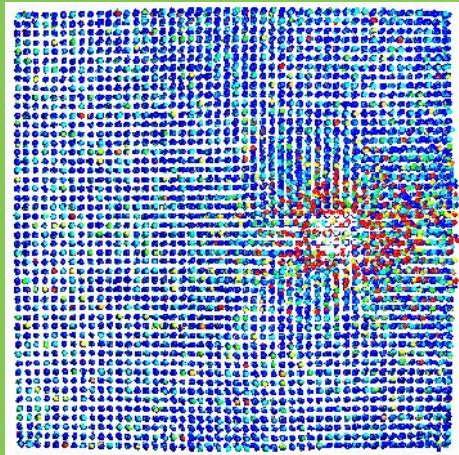
Esquema del sistema



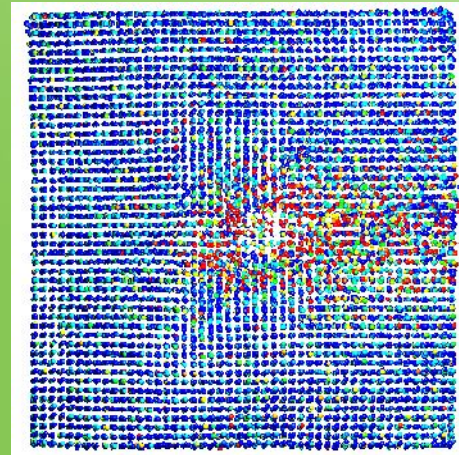
Velocidad constante de 1.5 Km/s



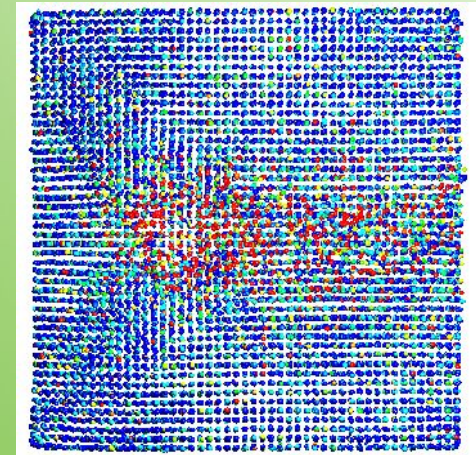
$t=1.2$ ps



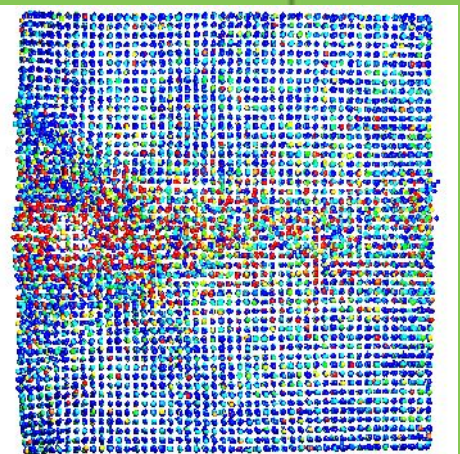
$t=2.4$ ps



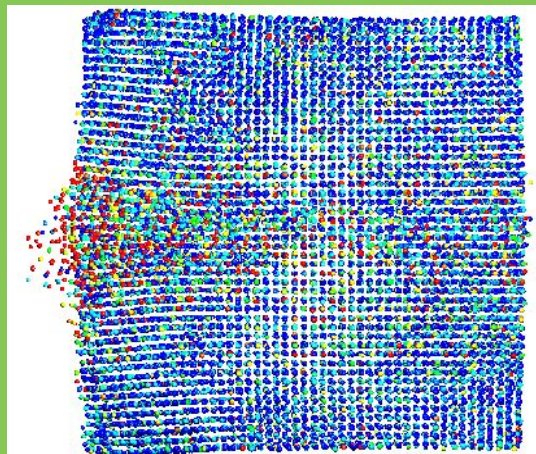
$t=3.6$ ps



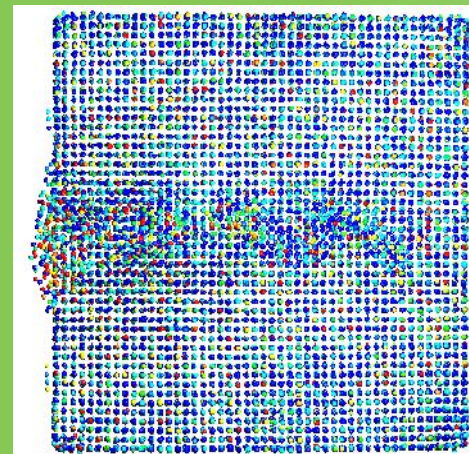
$t=4.8$ ps



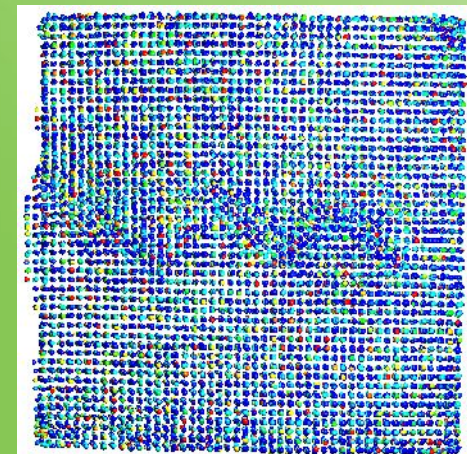
$t=6.0$ ps



$t=8.4$ ps



$t=15$ ps

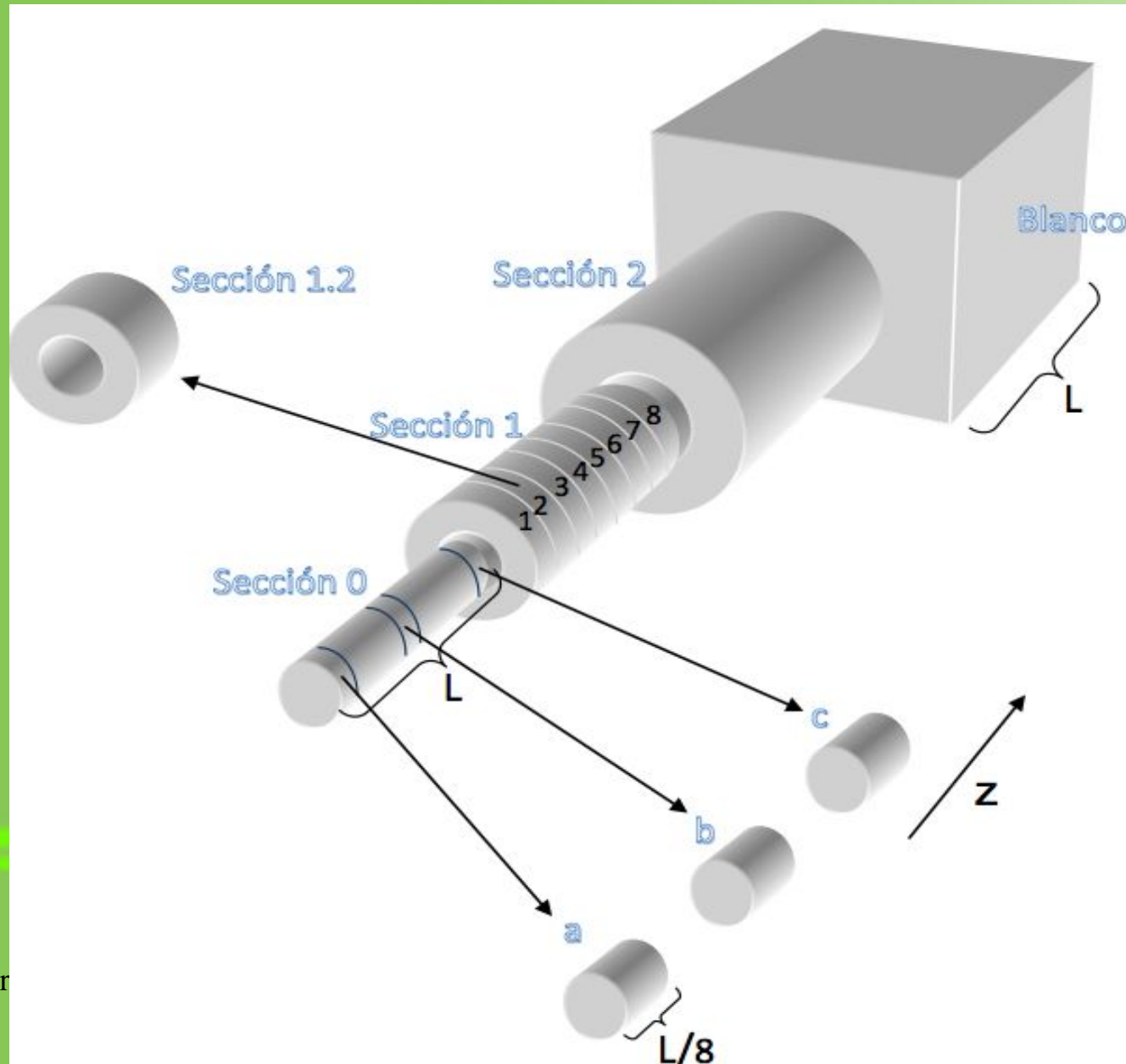


$t=28.2$ ps

Velocidad constante de 1.5 Km/s

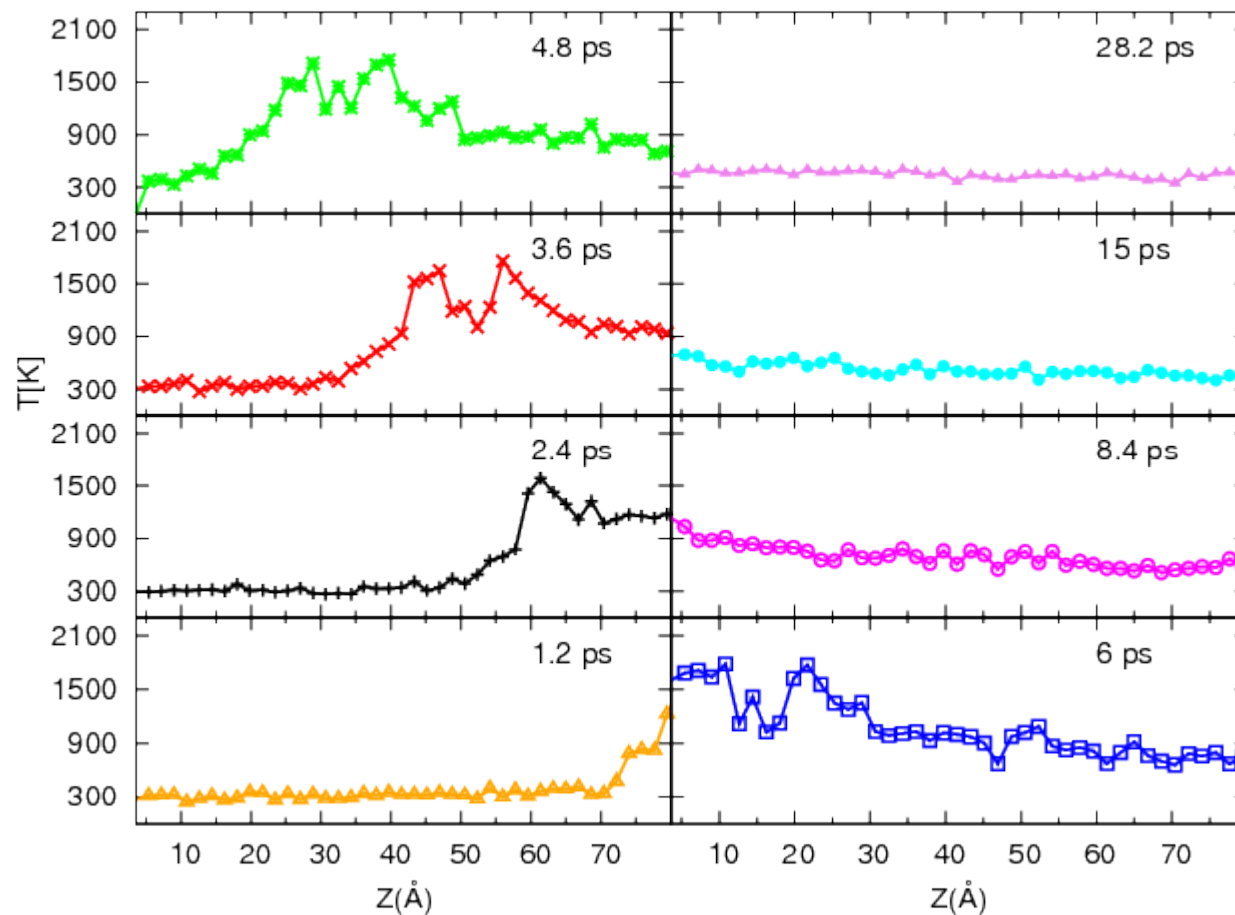
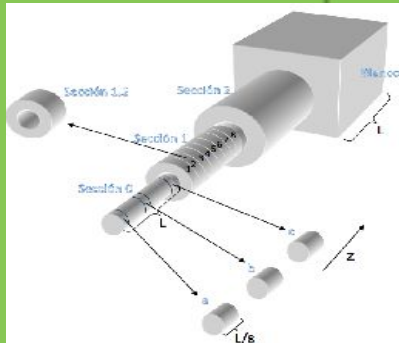


Para el análisis el blanco fue dividido como sigue:

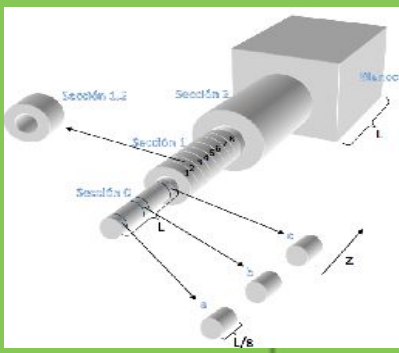


Velocidad constante de 1.5 Km/s

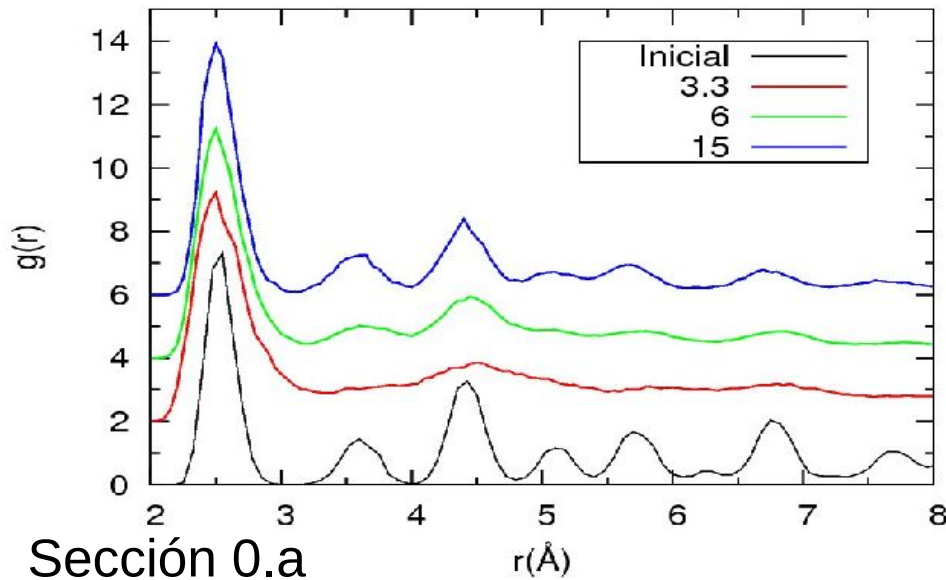
Sección 0



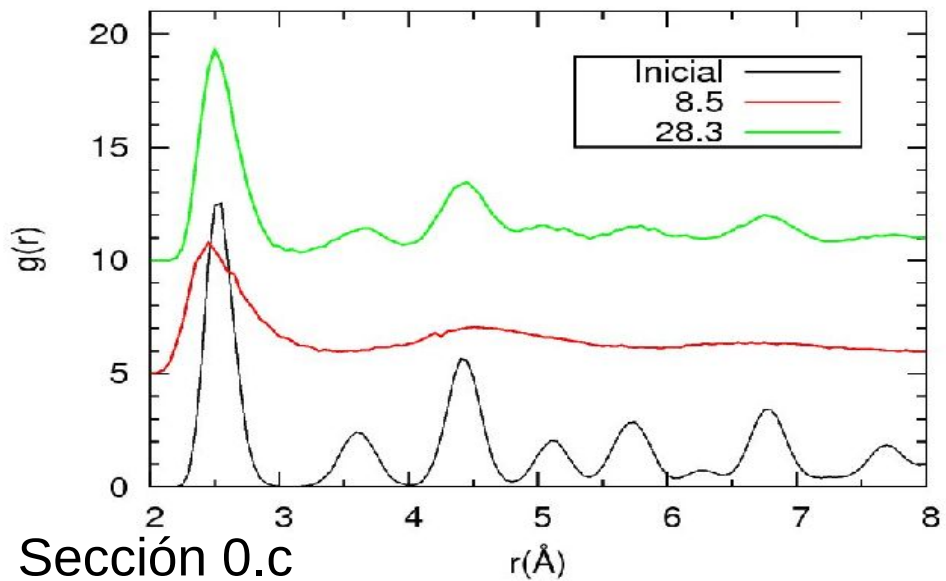
Velocidad constante de 1.5 Km/s



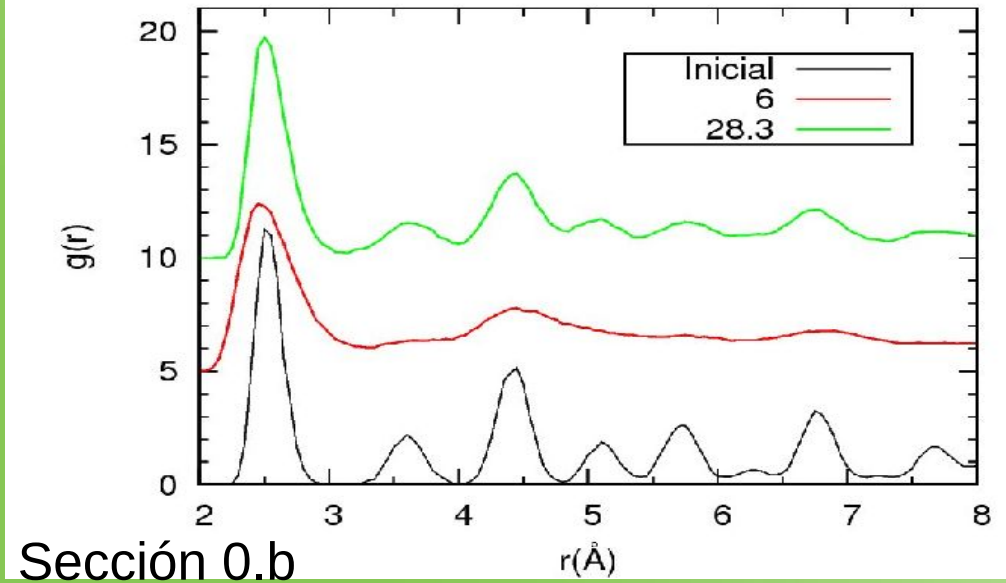
Distintos tiempos



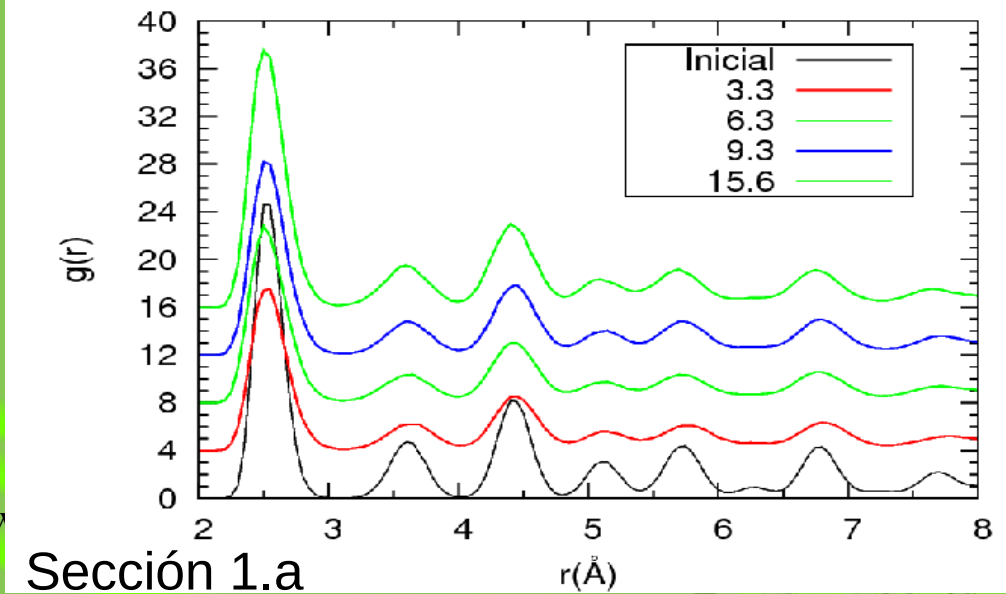
Sección 0.a



Sección 0.c

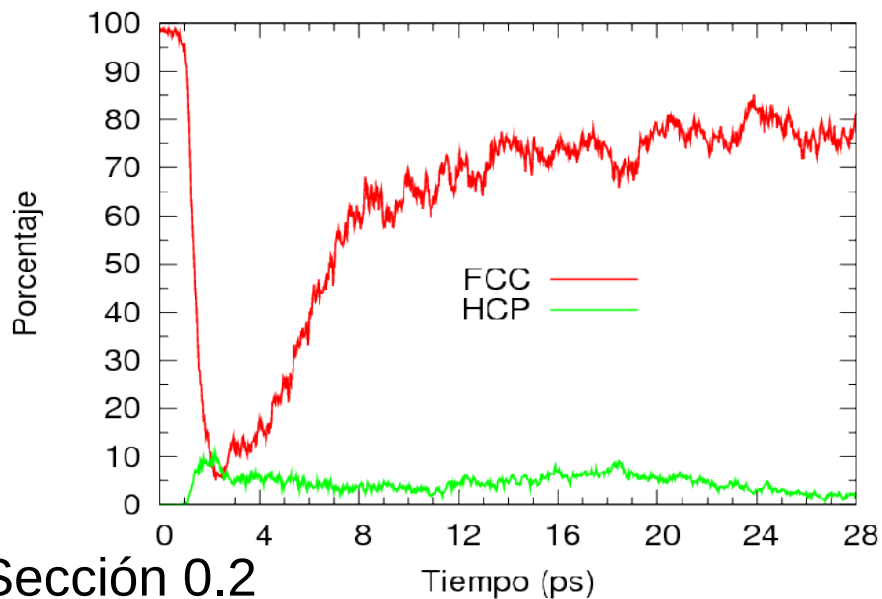
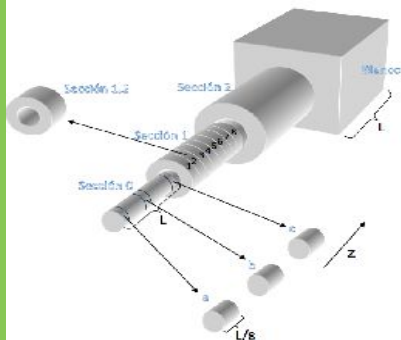


Sección 0.b

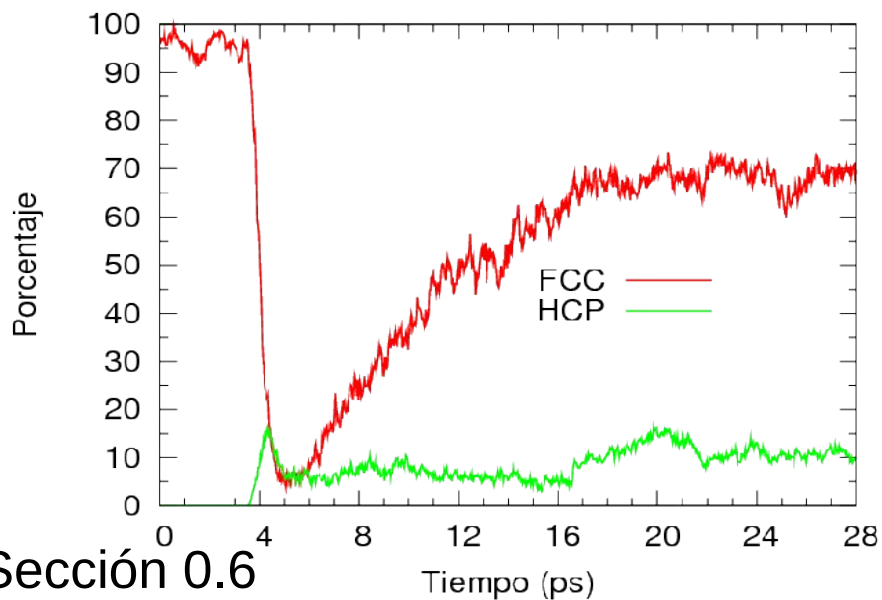


Sección 1.a

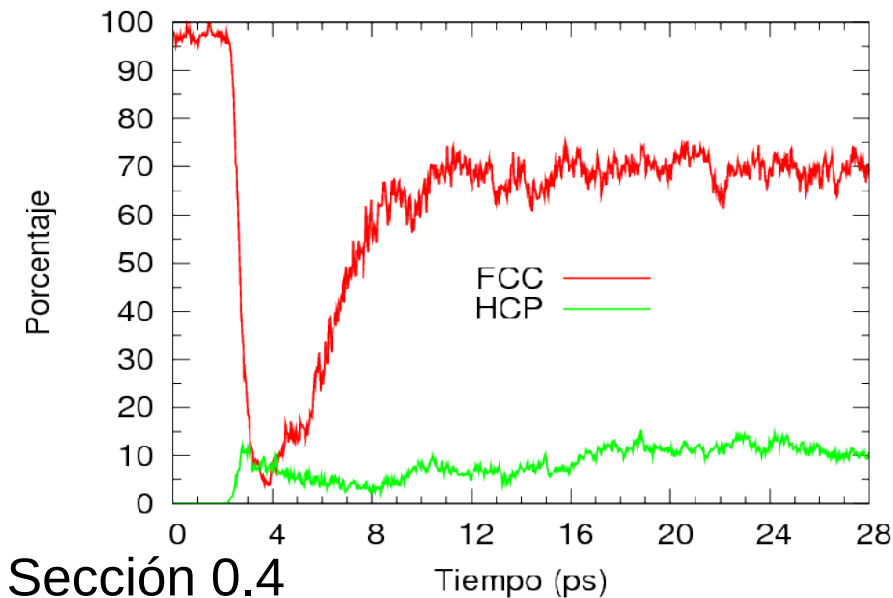
Velocidad constante de 1.5 Km/s



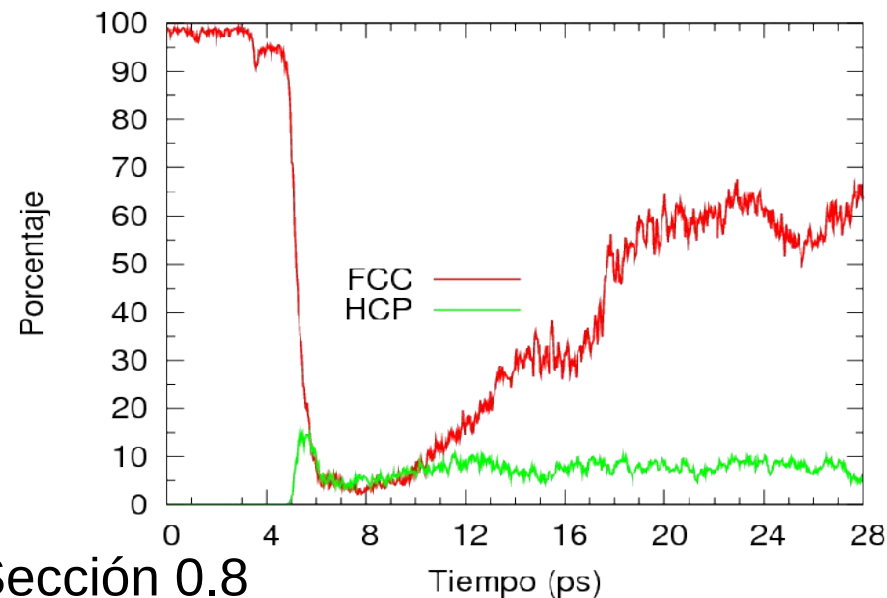
Sección 0.2



Sección 0.6

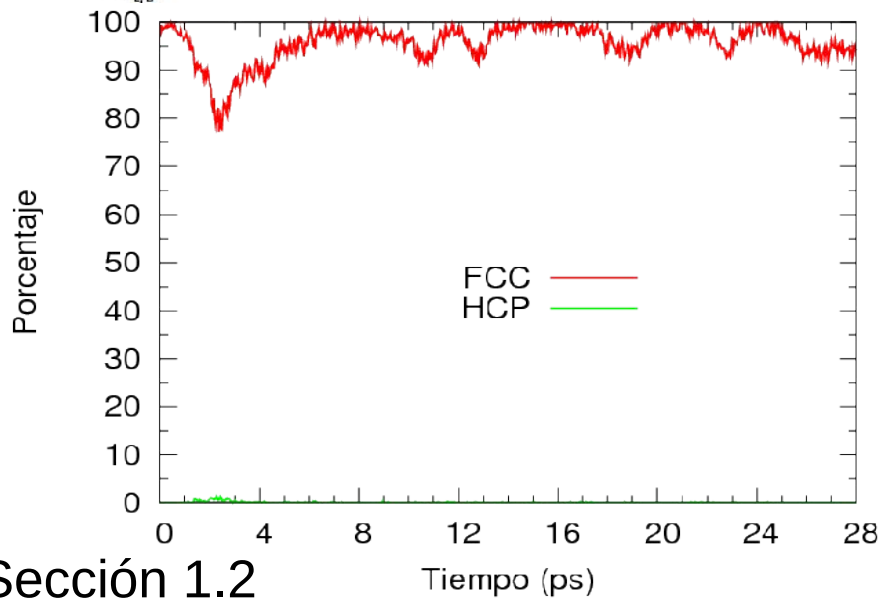
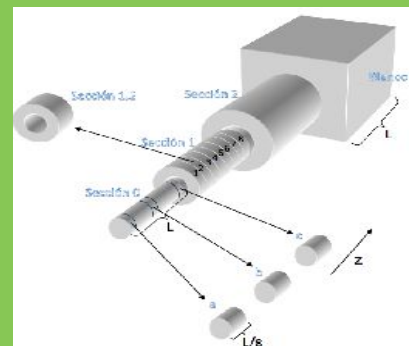


Sección 0.4

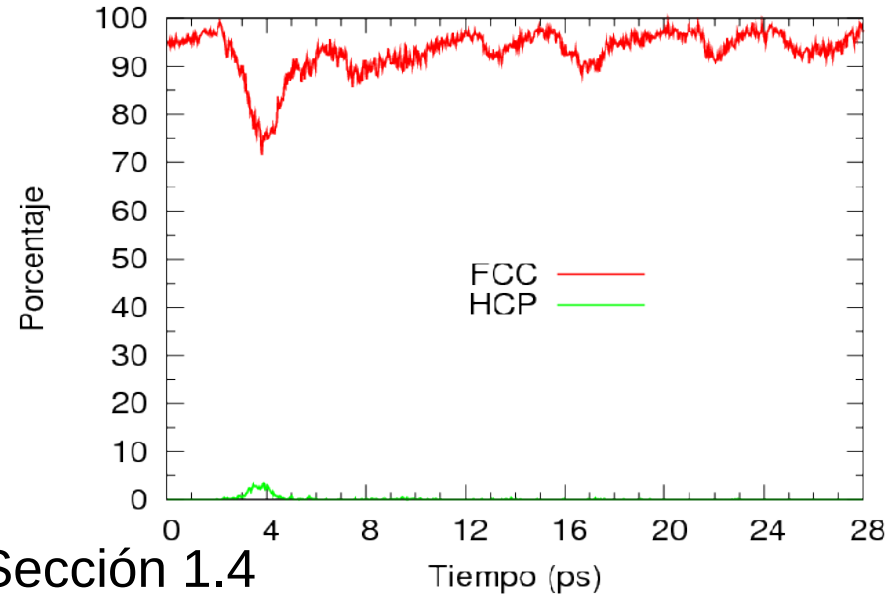


Sección 0.8

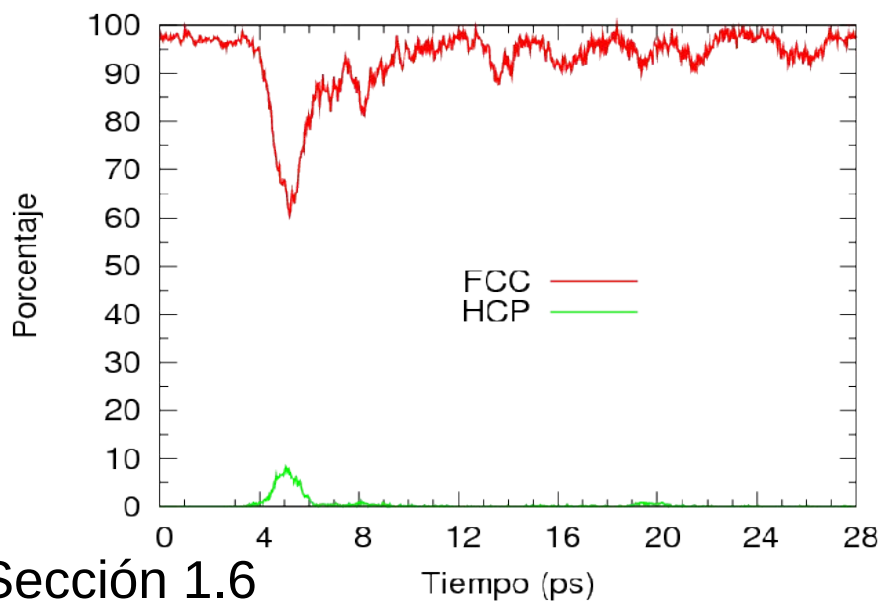
Velocidad constante de 1.5 Km/s



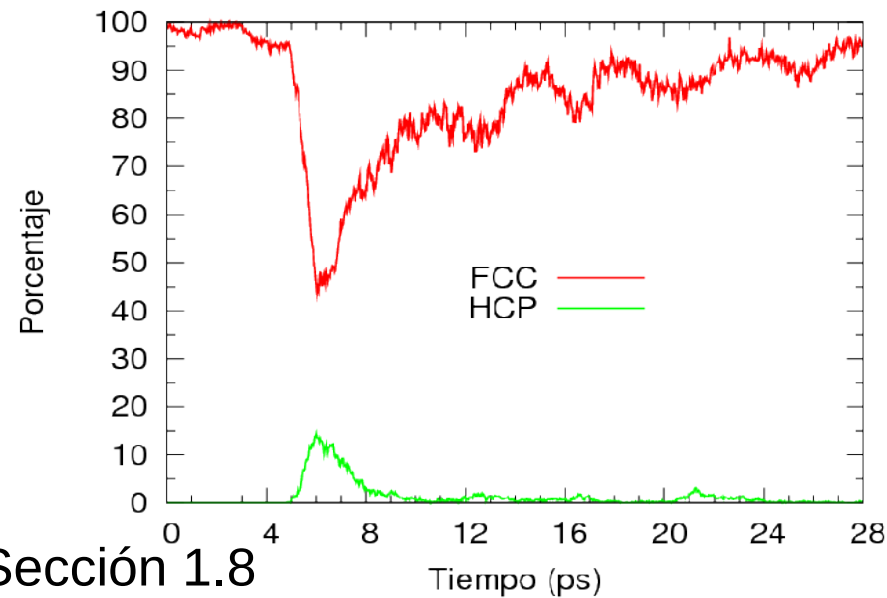
Sección 1.2



Sección 1.4



Sección 1.6

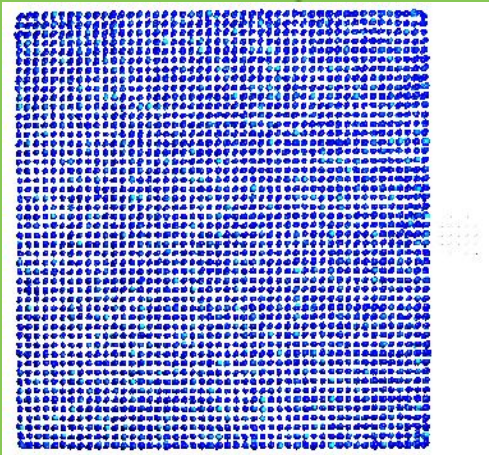


Sección 1.8

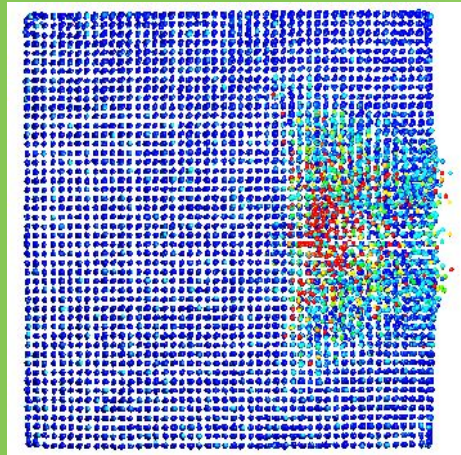
Velocidad constante de 5.0 Km/s



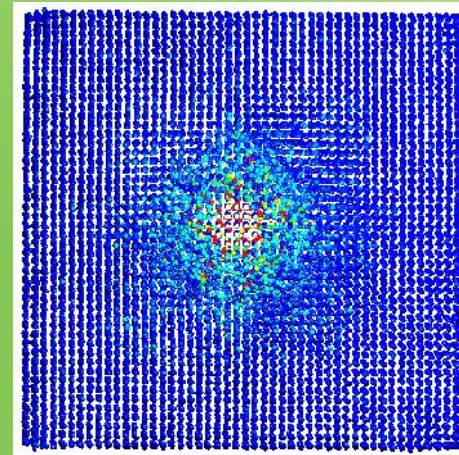
Velocidad constante de 5.0 Km/s



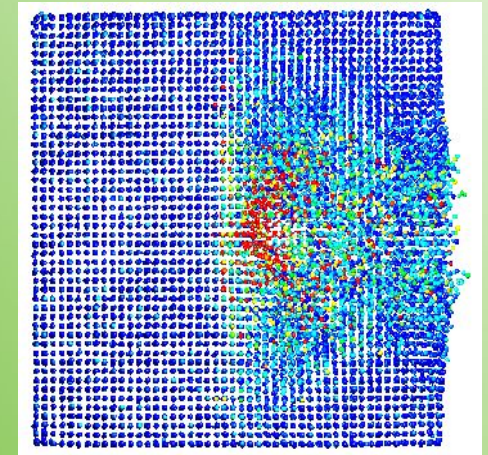
$t=0.12$ ps



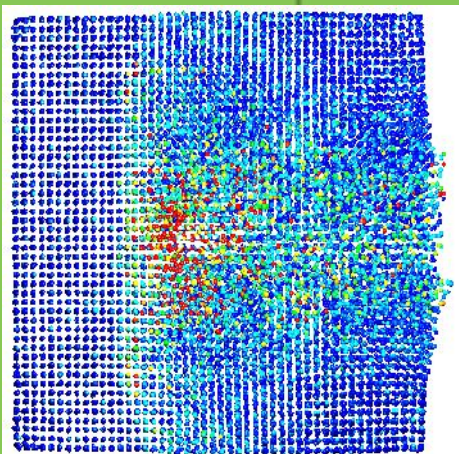
$t=0.6$ ps



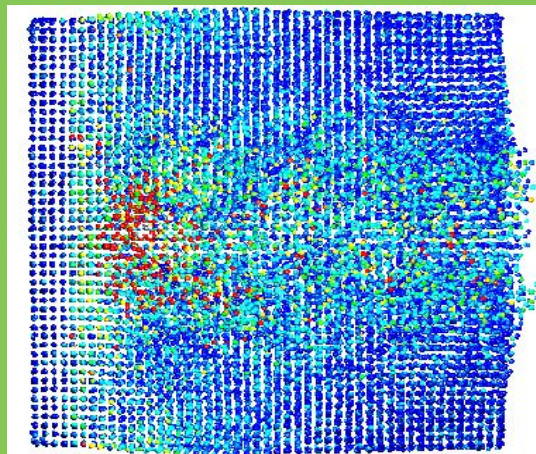
$t=0.6$ ps
Vista frontal



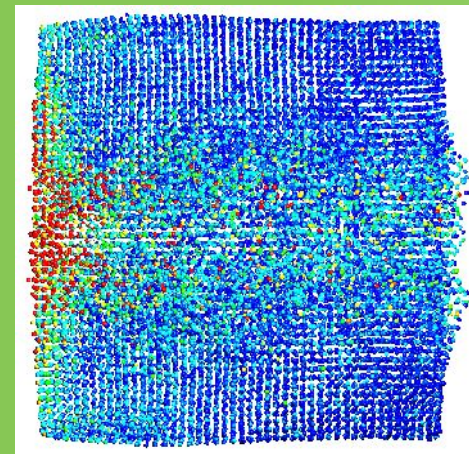
$t=0.9$ ps



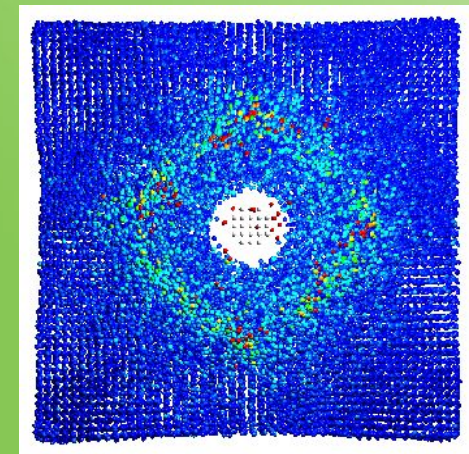
$t=1.2$ ps



$t=1.5$ ps

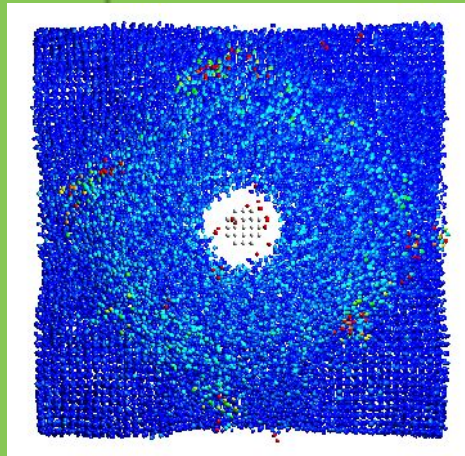


$t=1.8$ ps

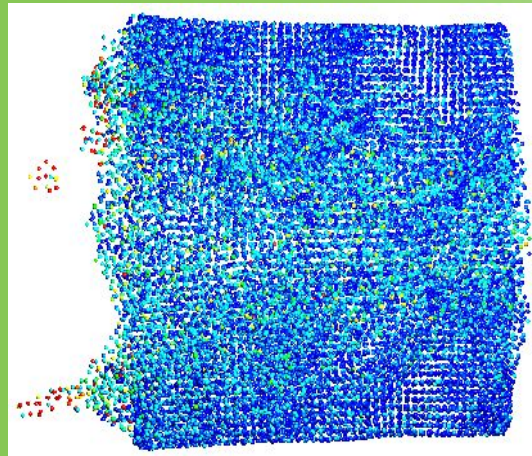


$t=2.8$ ps
Vista posterior

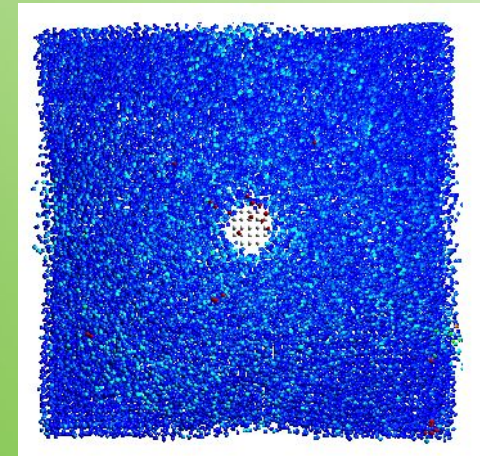
Velocidad constante de 5.0 Km/s



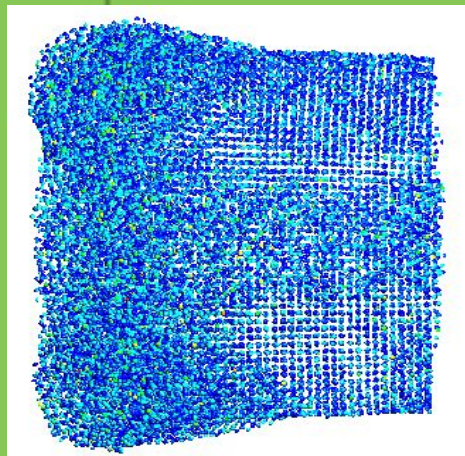
$t=3.9$ ps
Vista posterior



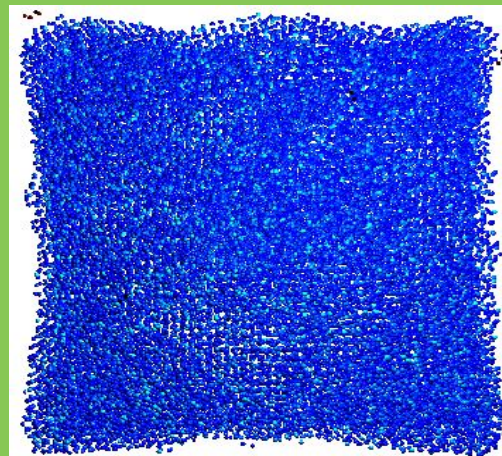
$t=4.8$ ps



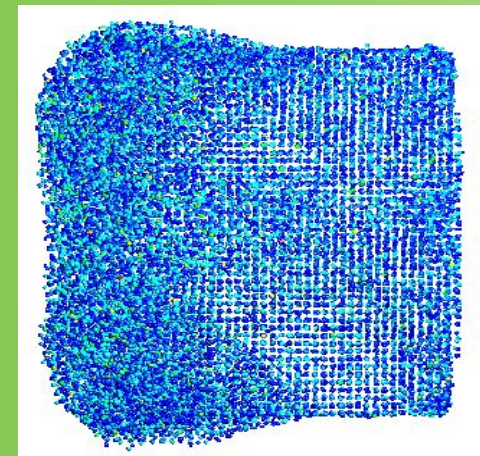
$t=6.0$ ps
Vista posterior



$t=18$ ps



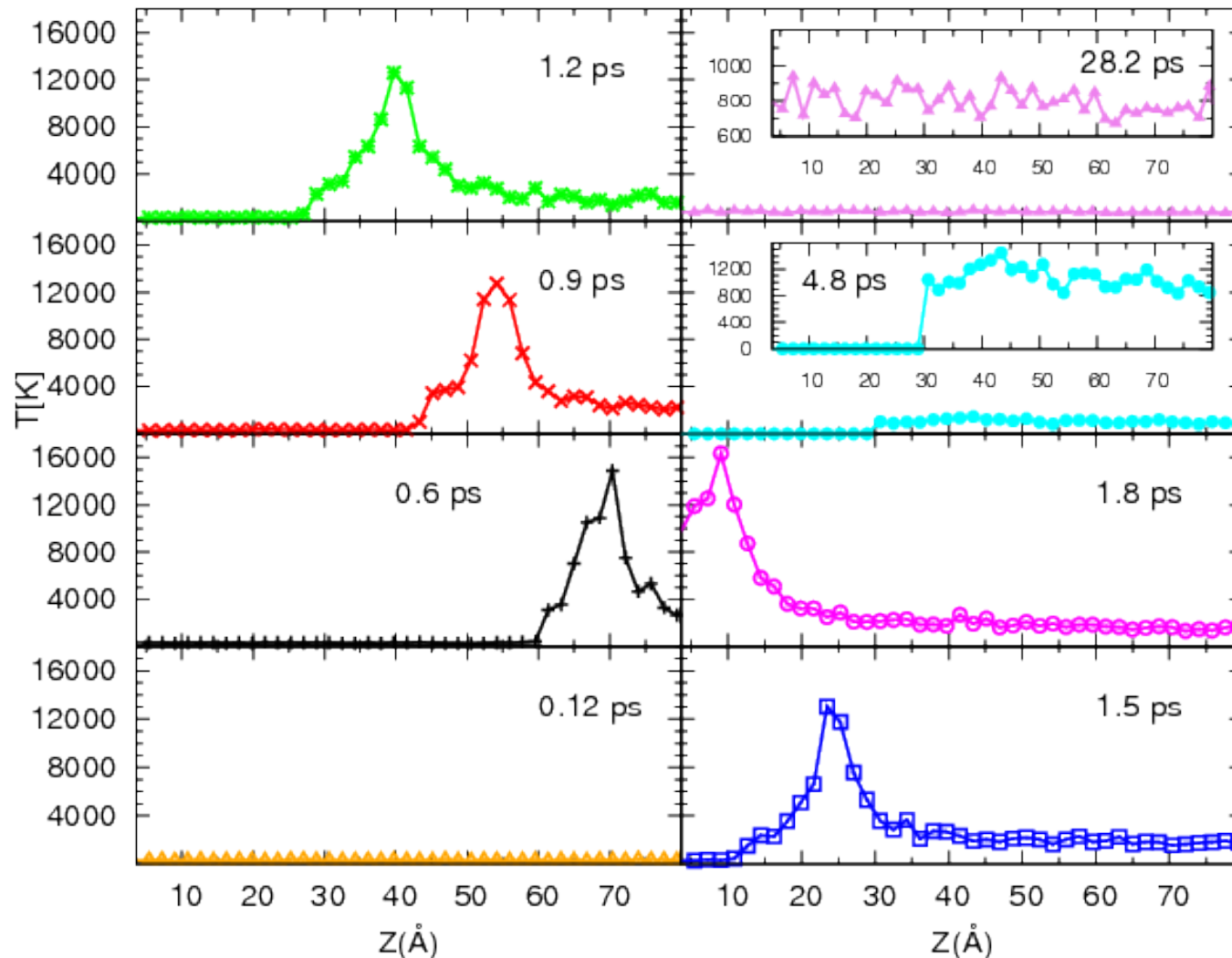
$t=24.9$ ps
Vista posterior



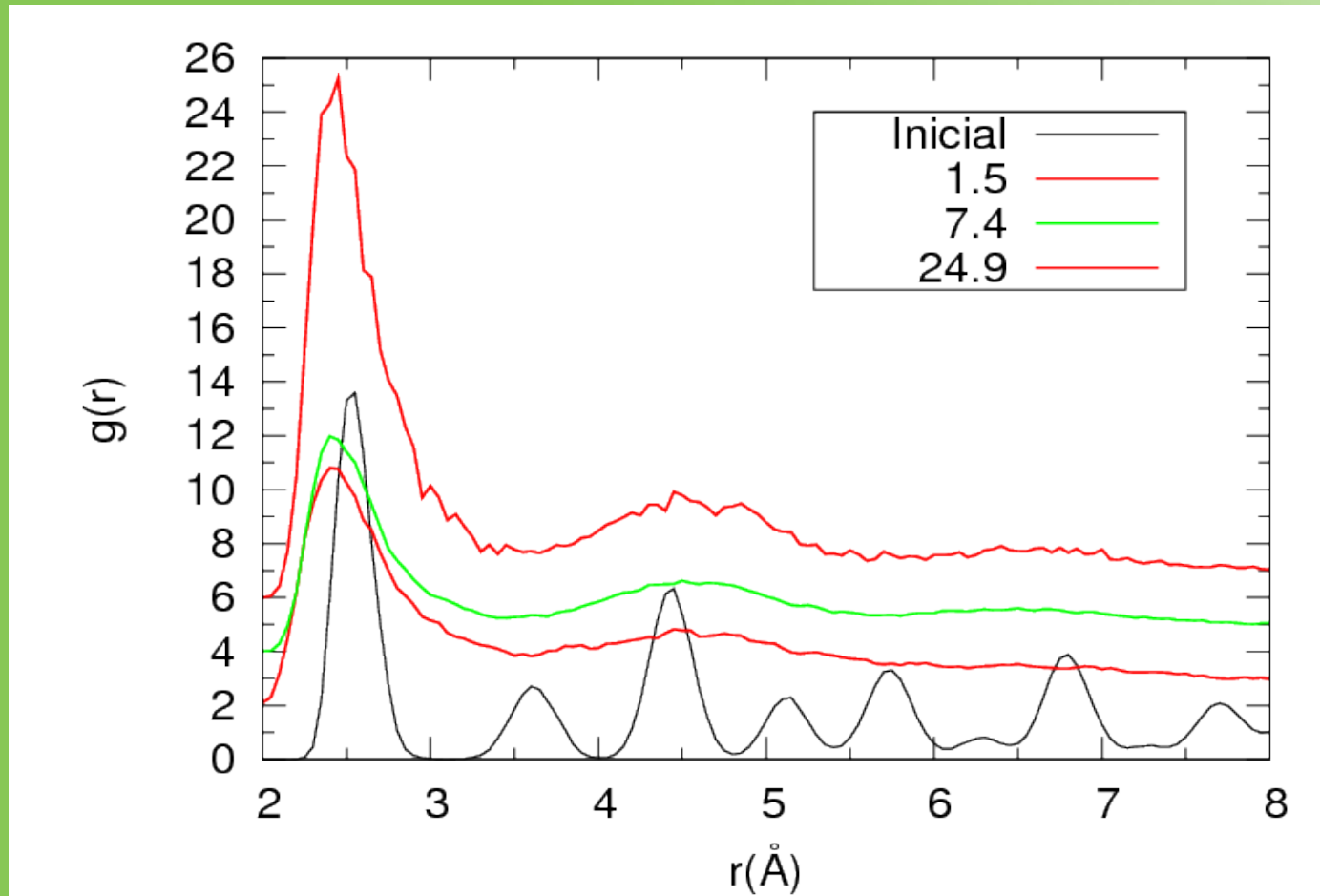
$t=28.2$ ps

Velocidad constante de 5.0 Km/s

Sección 0

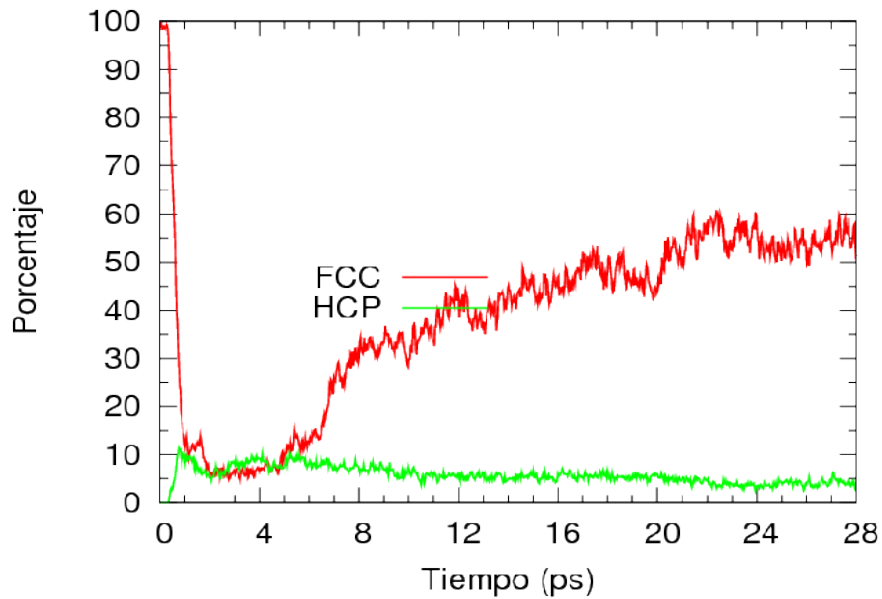


Velocidad constante de 5.0 Km/s

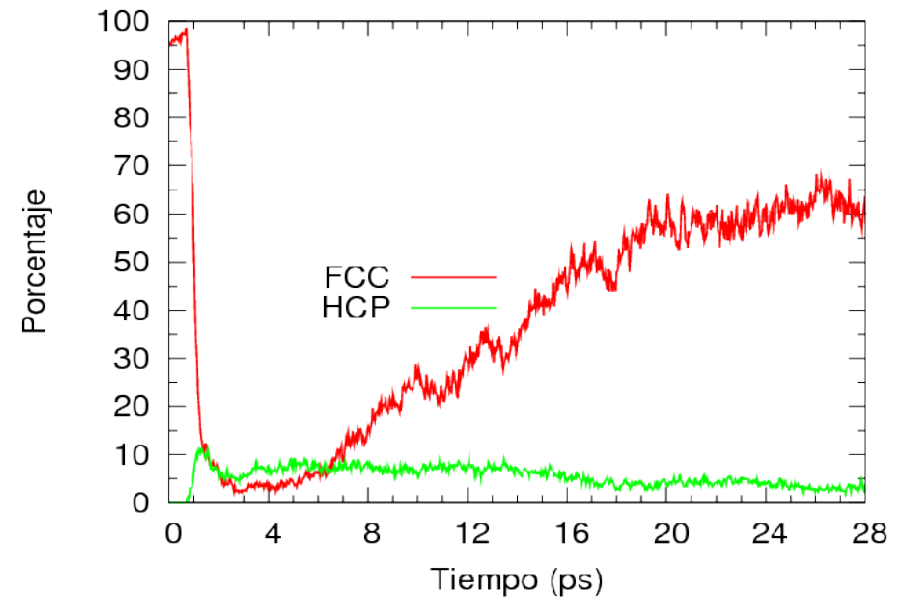


Sección 0.a

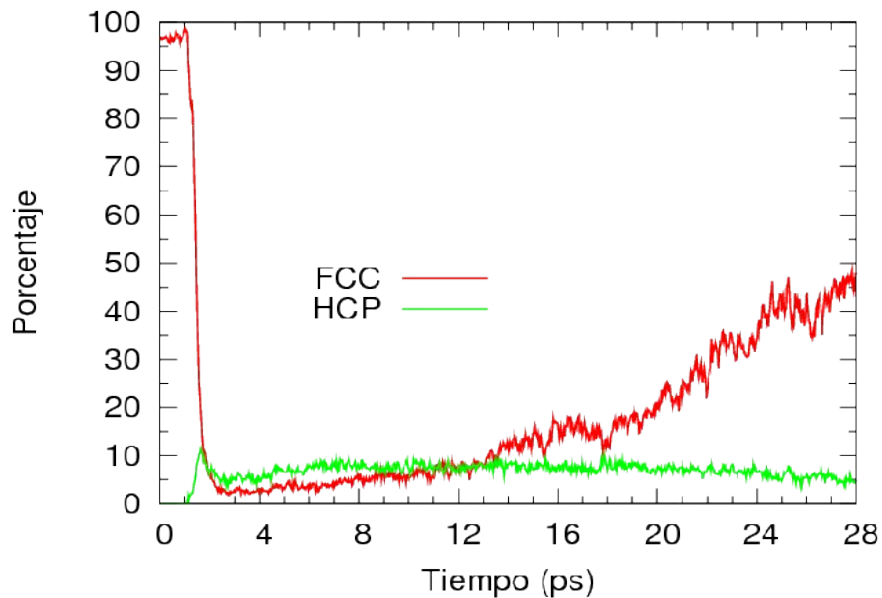
Velocidad constante de 5.0 Km/s



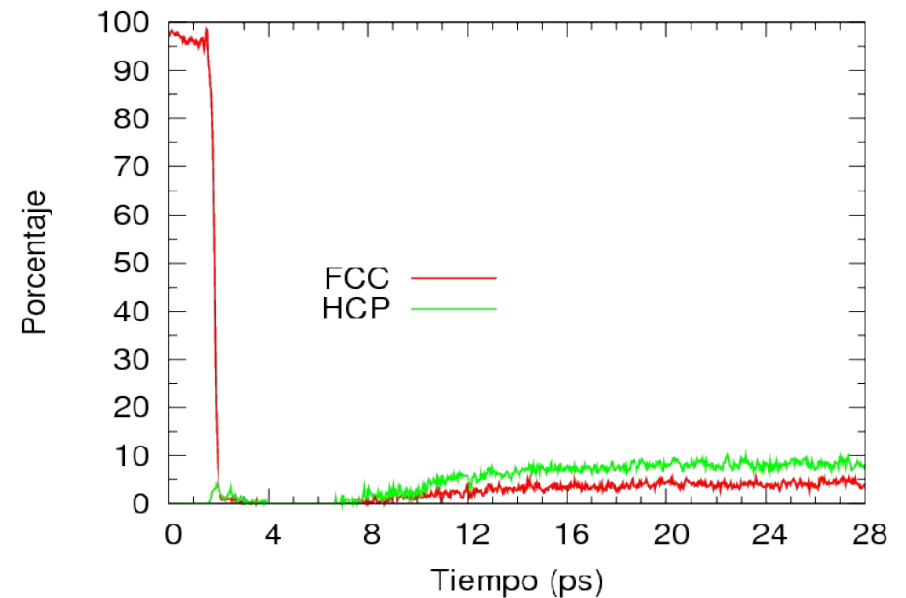
Sección 1.2



Sección 1.4



Sección 1.6

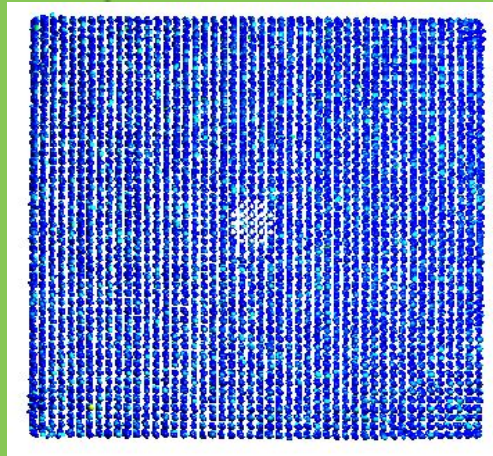


Sección 1.8

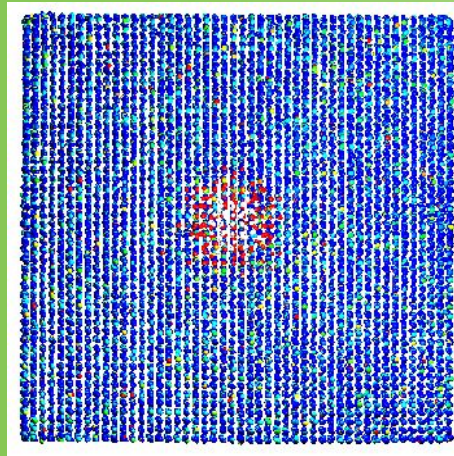
Velocidad inicial de 5.0 Km/s



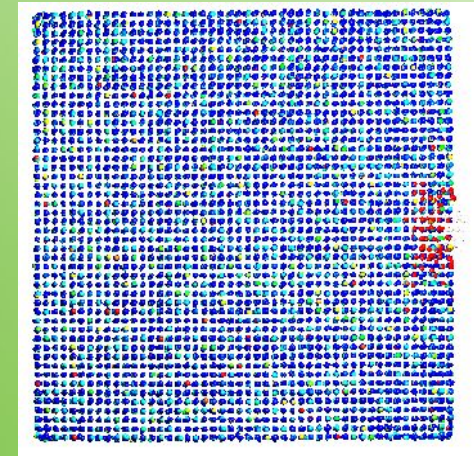
Velocidad inicial de 5.0 Km/s



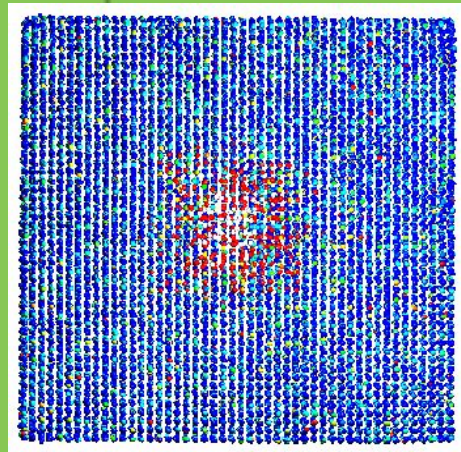
*Configuración inicial
Vista frontal*



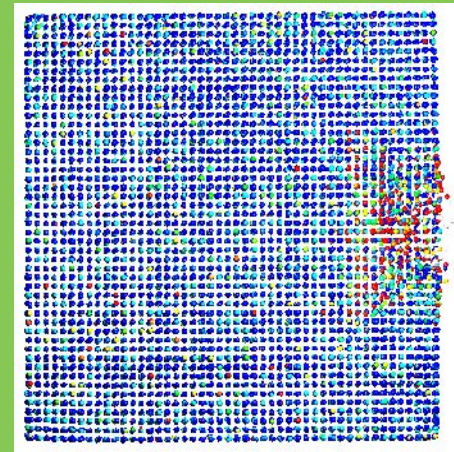
$t=0.3$ ps
Vista frontal



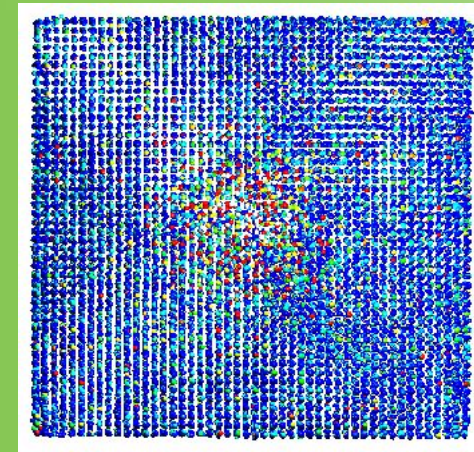
$t=0.3$ ps
Vista lateral



$t=0.4$ ps
Vista frontal

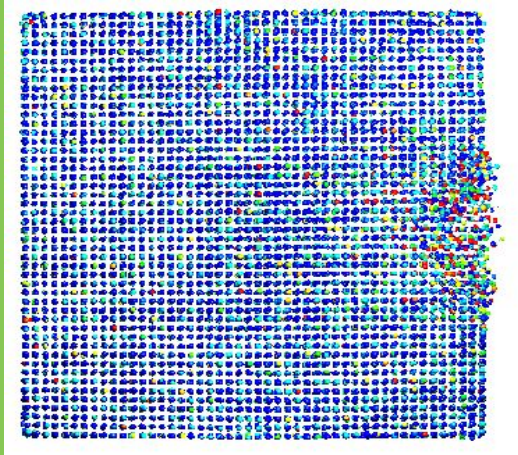


$t=0.5$ ps
Vista lateral

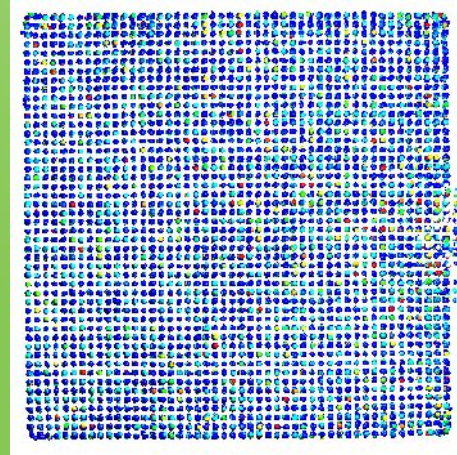


$t=1.5$ ps
Vista frontal

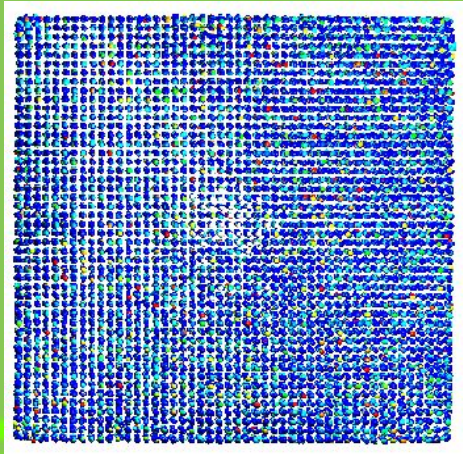
Velocidad inicial de 5.0 Km/s



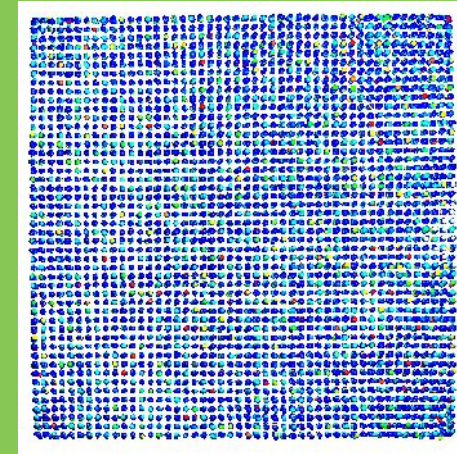
$t=1.5$ ps
Vista lateral



$t=6.5$ ps
Vista frontal



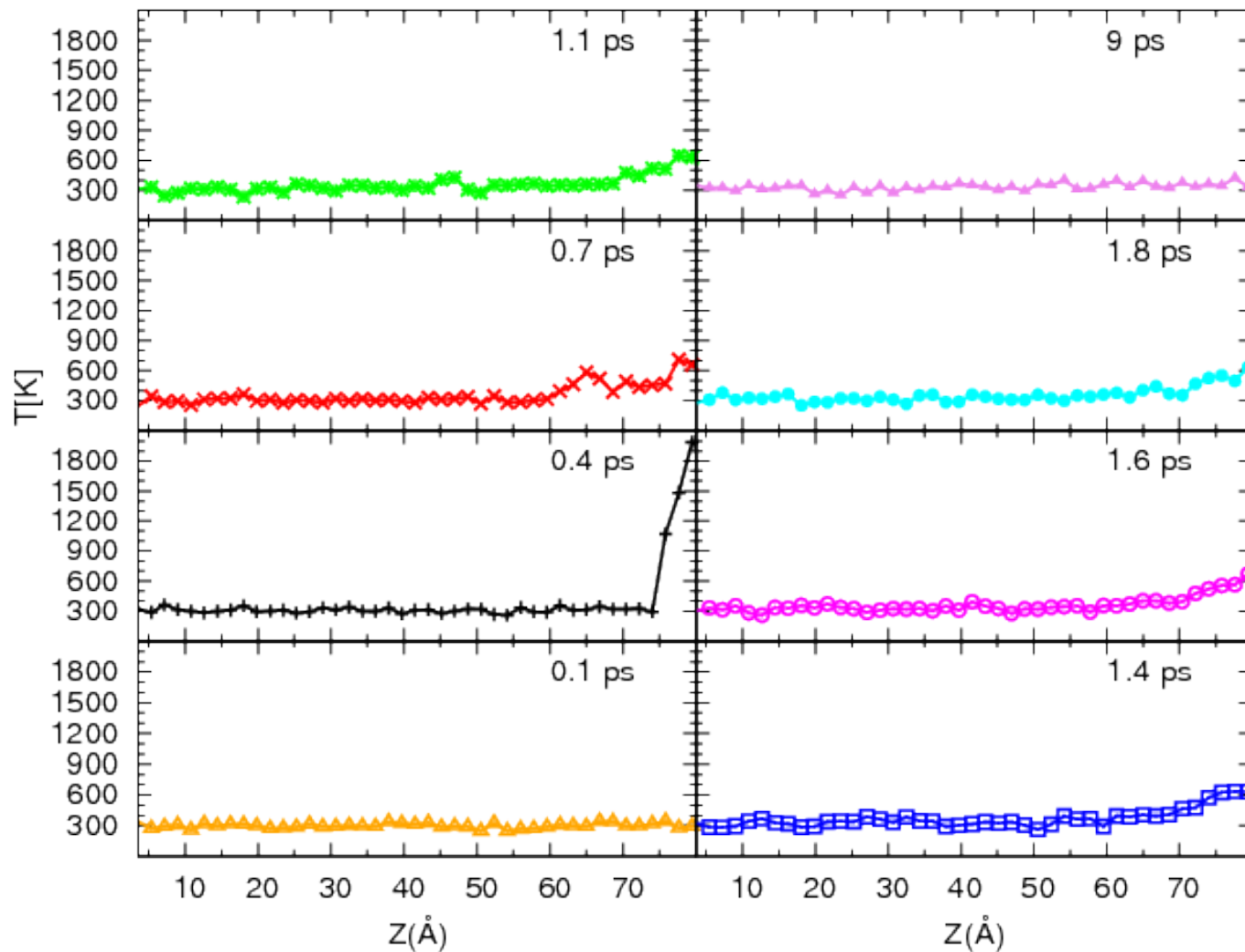
$t=9.9$ ps
Vista frontal



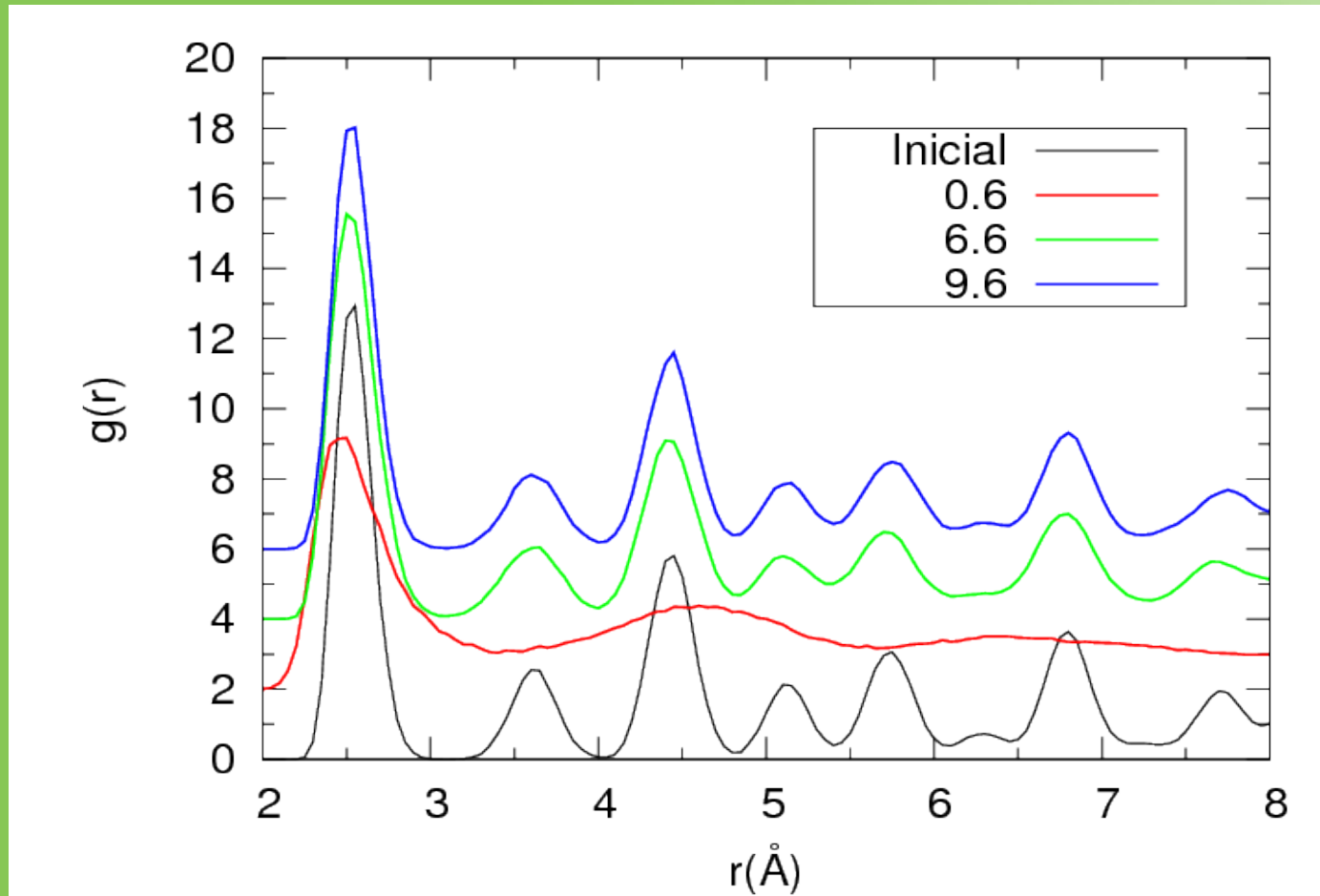
$t=9.9$ ps
Vista lateral

Velocidad inicial de 5.0 Km/s

Sección 0

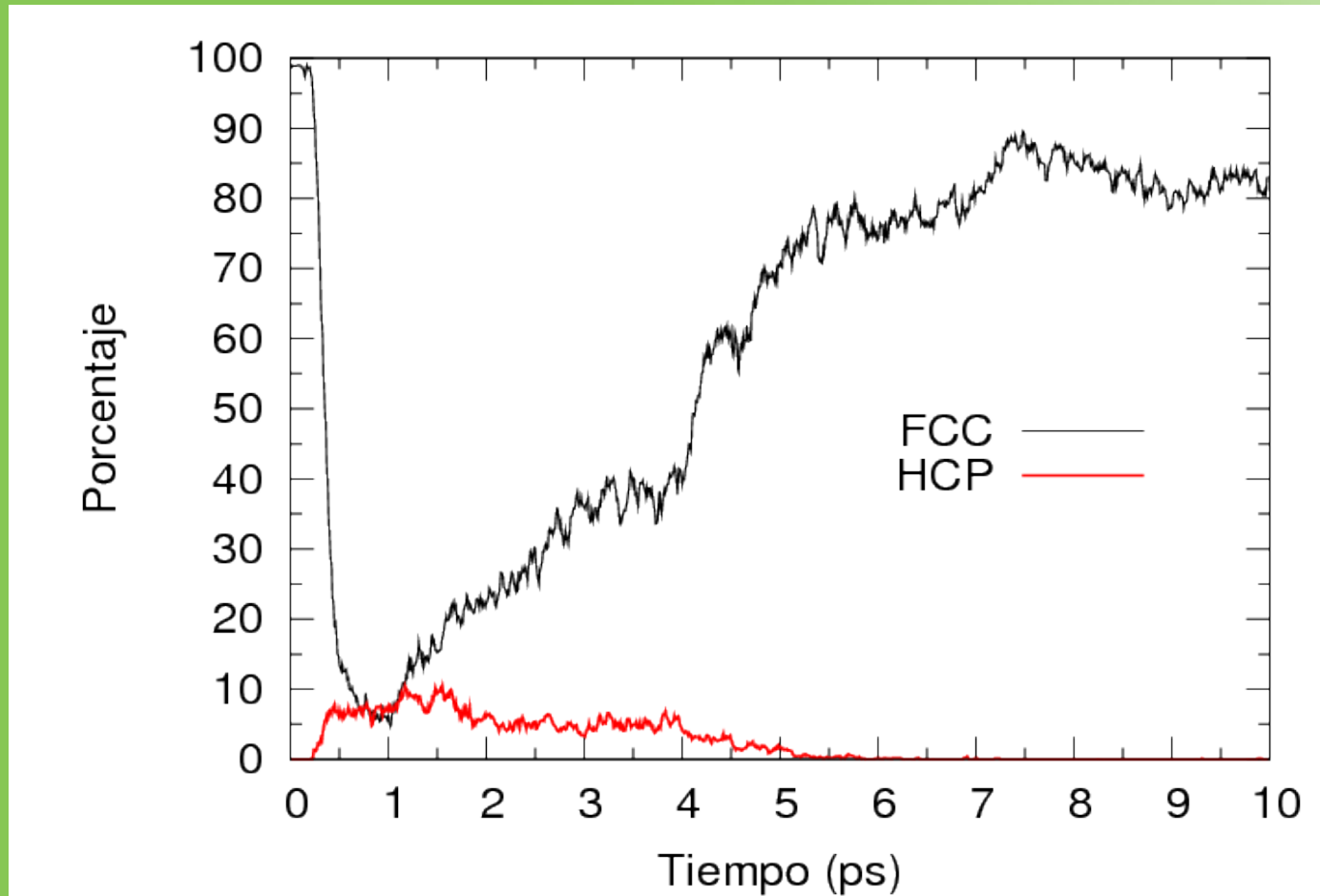


Velocidad inicial de 5.0 Km/s



Sección 0.a

Velocidad inicial de 5.0 Km/s



Sección 0.a

Conclusiones

- El proyectil rígido con velocidad constante:
 - Produce una estela de material perturbado.
 - Produce defectos (dislocaciones)
 - Para las velocidades de 1.5 y 3.0 Km/s recupera su estructura original.
 - A 5 Km/s el material se funde y luego gran parte del blanco queda en estado amorfo.

Conclusiones

- El proyectil con velocidad inicial:
 - Produce desorden configuracional en la zona de impacto.
 - Produce dislocaciones.
 - El proyectil se rompe incorporándose a la estructura del blanco.
 - El blanco vuelve a su estructura inicial.



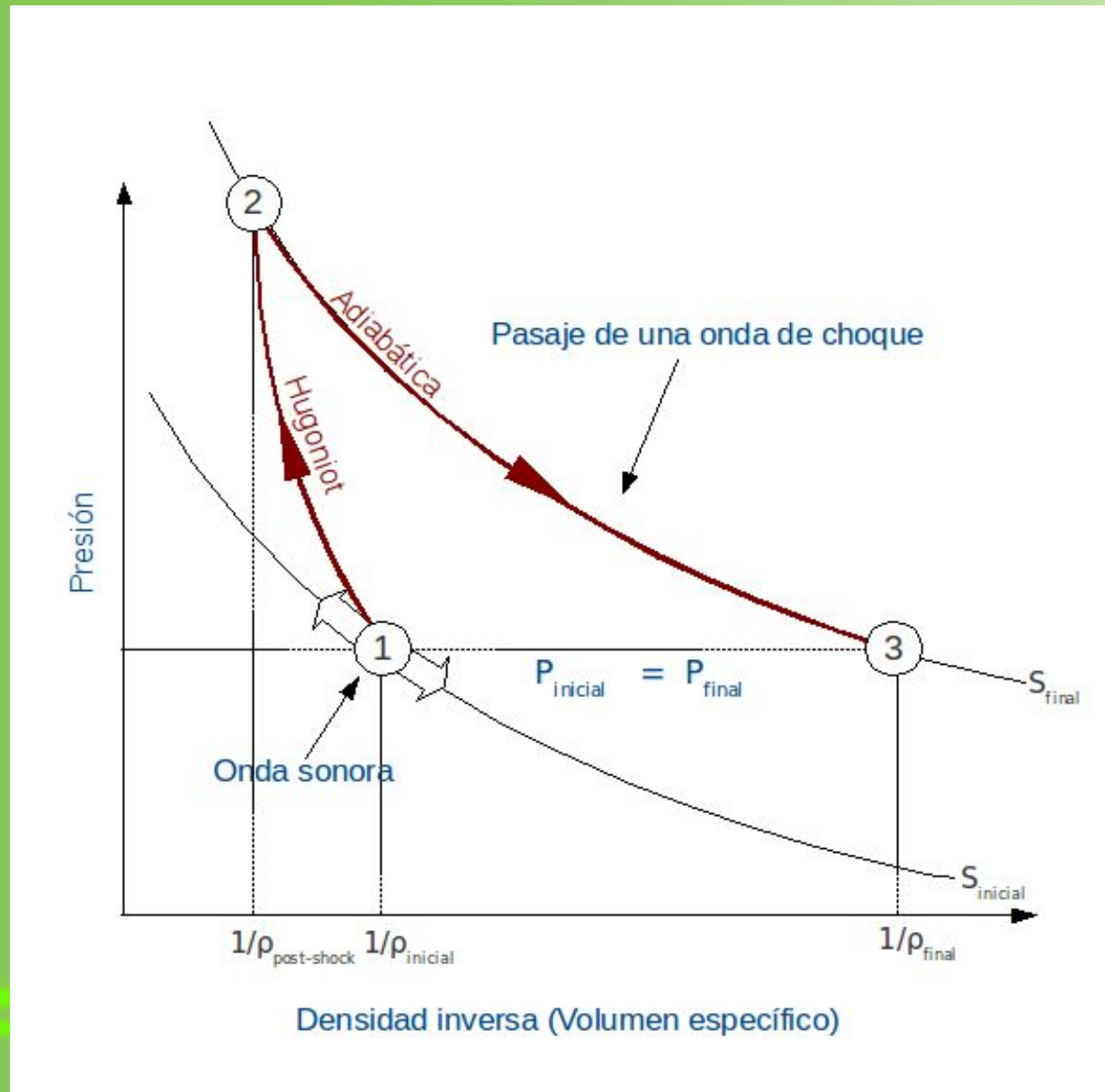
Agradecimientos

- Proyecto Enlace ENL 10/06 VRID-U. de Chile
- Proyecto Anillo Bicentenario-Chile ACT/24 "Computer Simulation Lab for nano-bio system".



Gracias por su atención ;-)

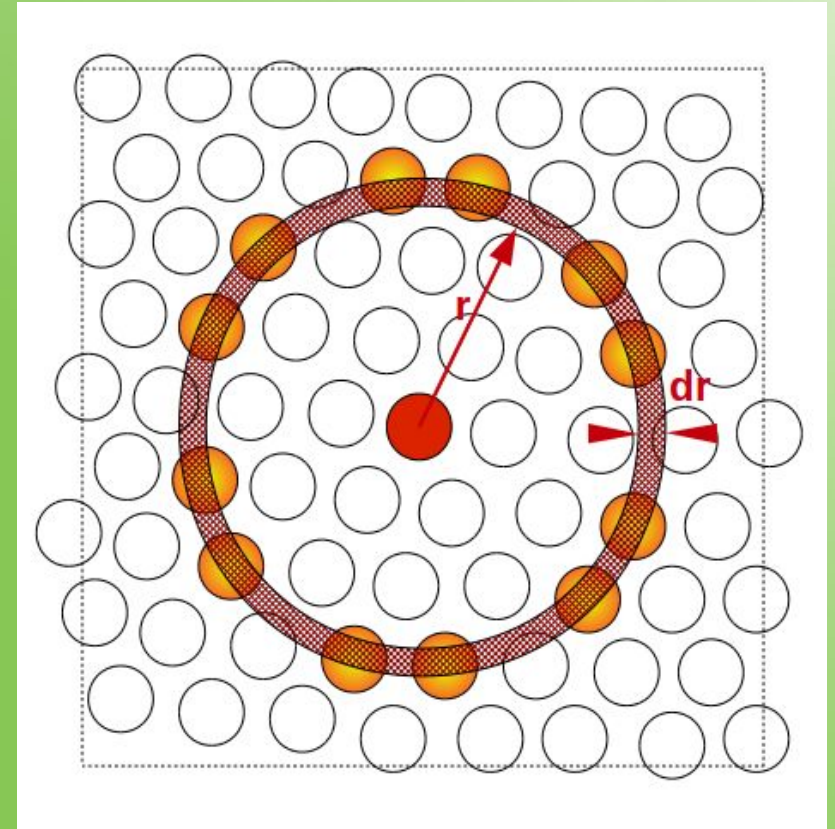
Ondas de Choque



Función de distribución de pares

- Esta propiedad da cuenta del vecindario atómico que tienen los átomos del sistema.
- La función de distribución de pares $g(r)$ está definida como:

$$\langle n(r, r + dr) \rangle = 4\pi r^2 \rho g(r) dr$$



Número de coordinación

- Indica el número de vecinos más cercanos de un átomo, llamados *primeros vecinos*.
- Este puede ser calculado a partir de la función de distribución de pares:

$$cn(R) = 4\pi \rho \int_0^R g(r) r^2 dr$$

- Fcc \rightarrow 12 , hcp \rightarrow 12, bcc \rightarrow 8