

SIMULACIÓN ATOMÍSTICA DE UN IMPACTO DE NANOPARTÍCULAS DE VIDRIO METÁLICO



Javier Wachter¹, Matías Sepúlveda², Gonzalo Gutierrez²

¹Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile.

²Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.

javier.wachter@gmail.com

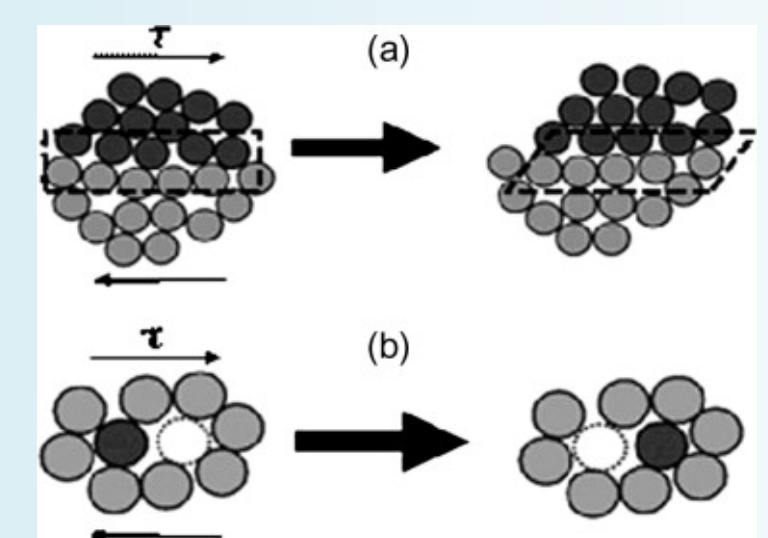
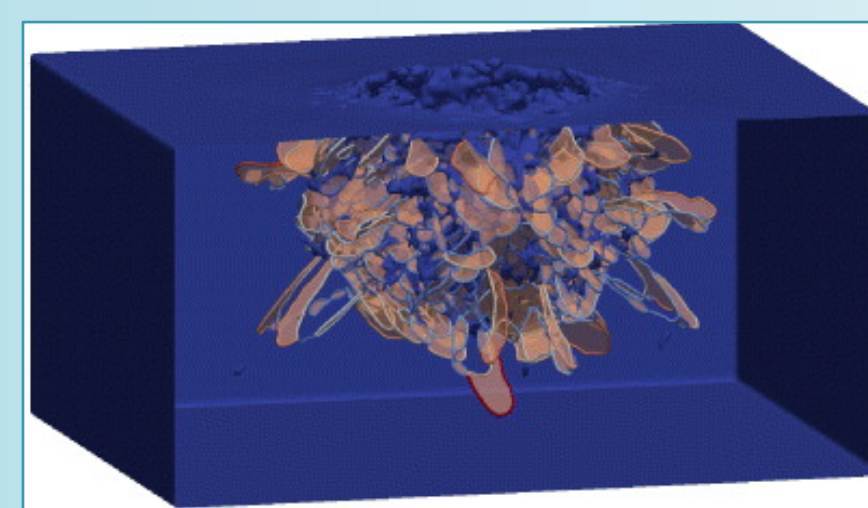


Abstract: New manufacture techniques of parts from metallic glasses have been developed in recent years. In particular, with the technique of cold gas dynamic spray (CGDS), metallic glasses can be produced in appreciable amounts. At present it is not yet well understood the deformation process that allows high degrees of compaction obtained with this technique. In this work we study the impact of a Cu-Zr nanoparticle-based metallic glass on a metallic glass surface by molecular dynamics simulations to elucidate the processes of deformation at high strain rates.

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 aspersion 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.

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

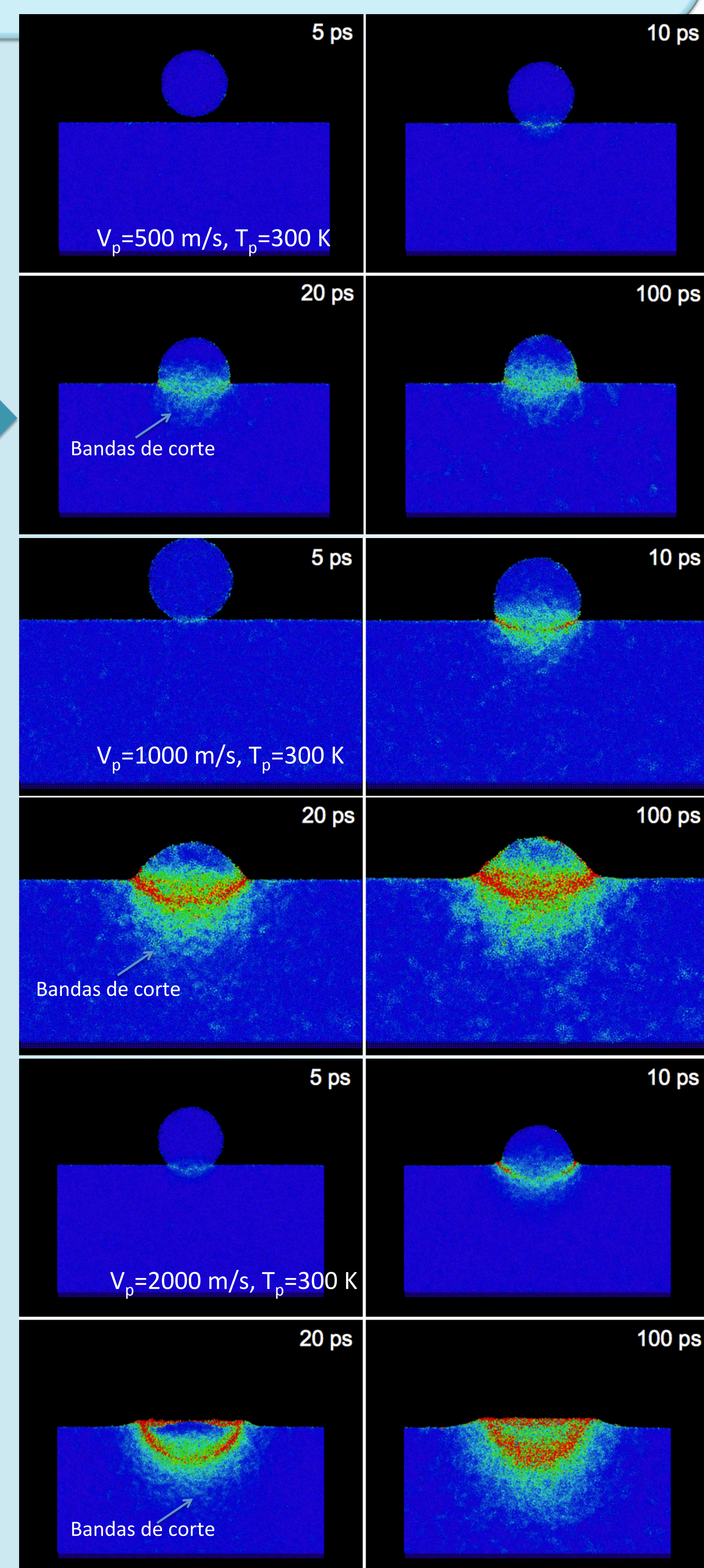
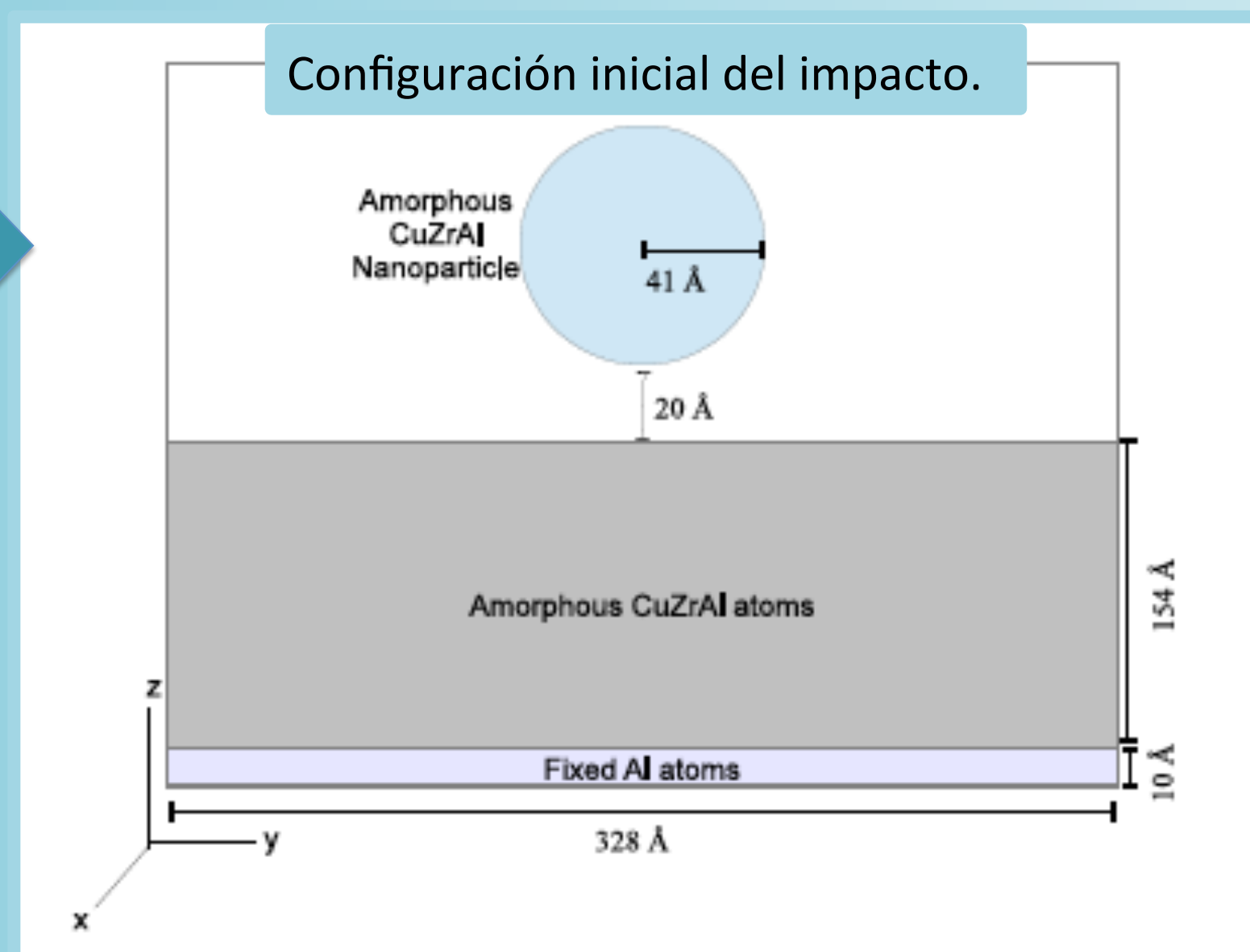
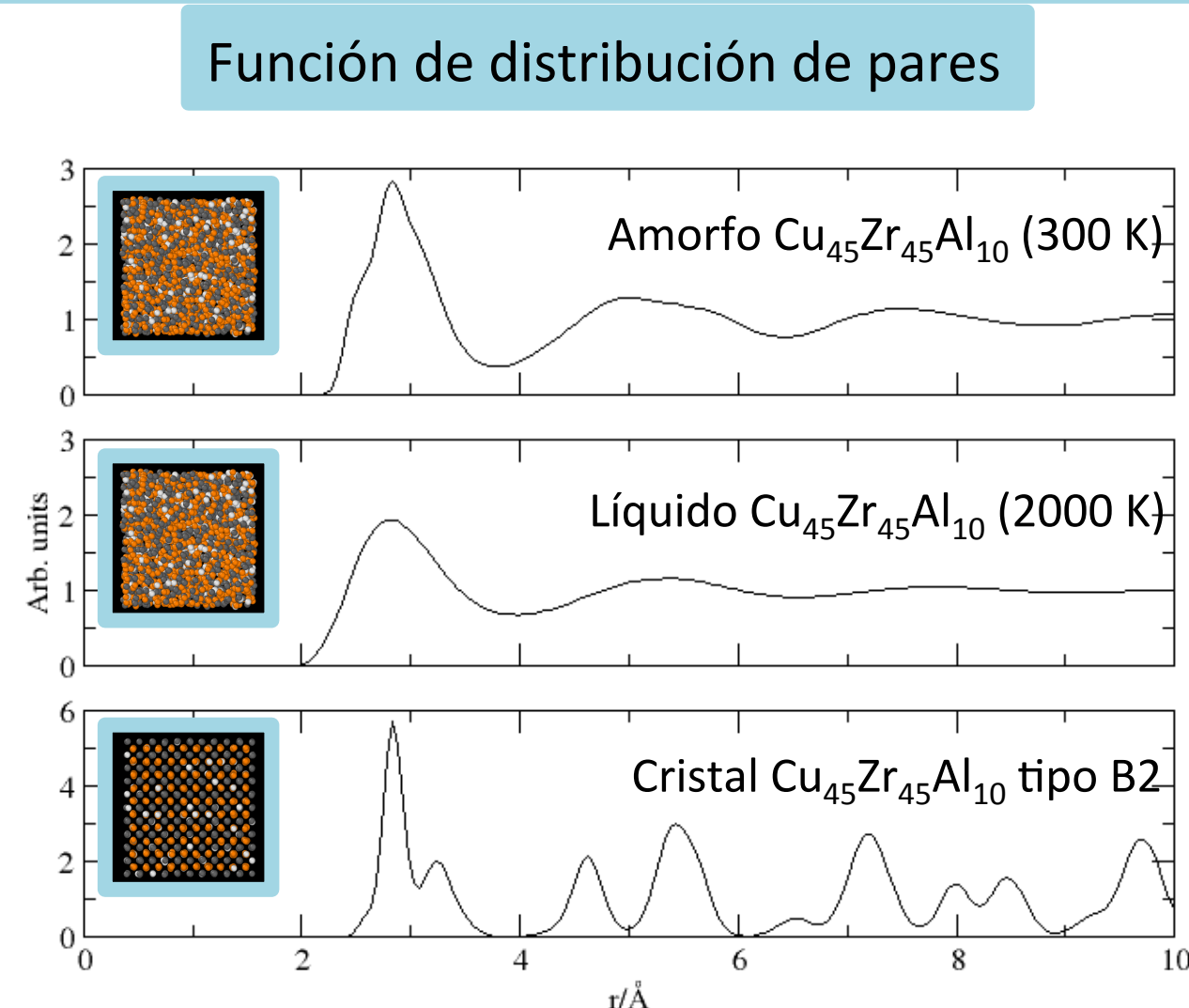
¿Material amorfo?

- Zonas de transformación de corte.
- Salto atómico local

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.

La formación y coalescencia de las zonas de transformación de corte producen zonas de gran localización de deformación plástica: **Bandas de corte (SB, shear bands)**. Debido a la dificultad experimental para observar y entender el proceso de formación de las SB es interesante estudiar el fenómeno usando simulaciones de dinámica molecular.



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).

Detalles de las simulaciones
 -Programa: LAMMPS, 1 Millón de átomos
 -Coloreado por deformación atómica usando OVITO[5]
 -Colectividad NVE
 -Condiciones de borde periódicas en x e y
 -Átomos fijos (Al) con termostato de Langevin a 300 K
 -64 procesadores, 8h de cálculo por impacto, en el NLHPC-Chile.

Variables del estudio

Simulación	v_p (m/s)	T_p (K)
S1	500	100
S2	500	300
S3	1000	100
S4	1000	300
S5	2000	100
S6	2000	300

Agradecimientos:

J. Wachter agradece el apoyo del Programa Nacional de Becas de Posgrado, Conicyt (D-21090391) al National Laboratory for High Performance Computing-Chile.

Referencias:

- [1] M.F. Ashby, A.L. Greer, Scripta Mater. **54**, 321 (2006).
- [2] R. Fernández, W. Carrasco, A. Zúñiga, J. Of Non-Crys. Sol. **356**, 1665 (2010).
- [3] S. Plimpton, J. Comp. Phys., **117**, 1-19 (1995). <http://lammps.sandia.gov/>
- [4] Y.Q. Cheng, E. Ma, Prog. In Mater. Sci. **56**, 379 (2011).
- [5] A. Stukowski, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **18** (2010), 015012. <http://ovito.org>