



**Pequeñas cosas para grandes problemas:**

**nanotecnología y simulación computacional**

---

*Gonzalo Gutiérrez*

Grupo de NanoMateriales, [www.gnm.cl](http://www.gnm.cl)  
Departamento de Física, Facultad de Ciencias,  
Universidad de Chile

[gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl](mailto:gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl)  
<http://fisica.ciencias.uchile.cl/~gonzalo>

# Plan de la presentación

---

## 1. Introducción

- (Nanomateriales) Materiales, lo macro, lo micro y lo que queremos.

## 2. Herramientas teóricas y experimentales

## 3. Simulación Computacional

- Moviendo los átomos

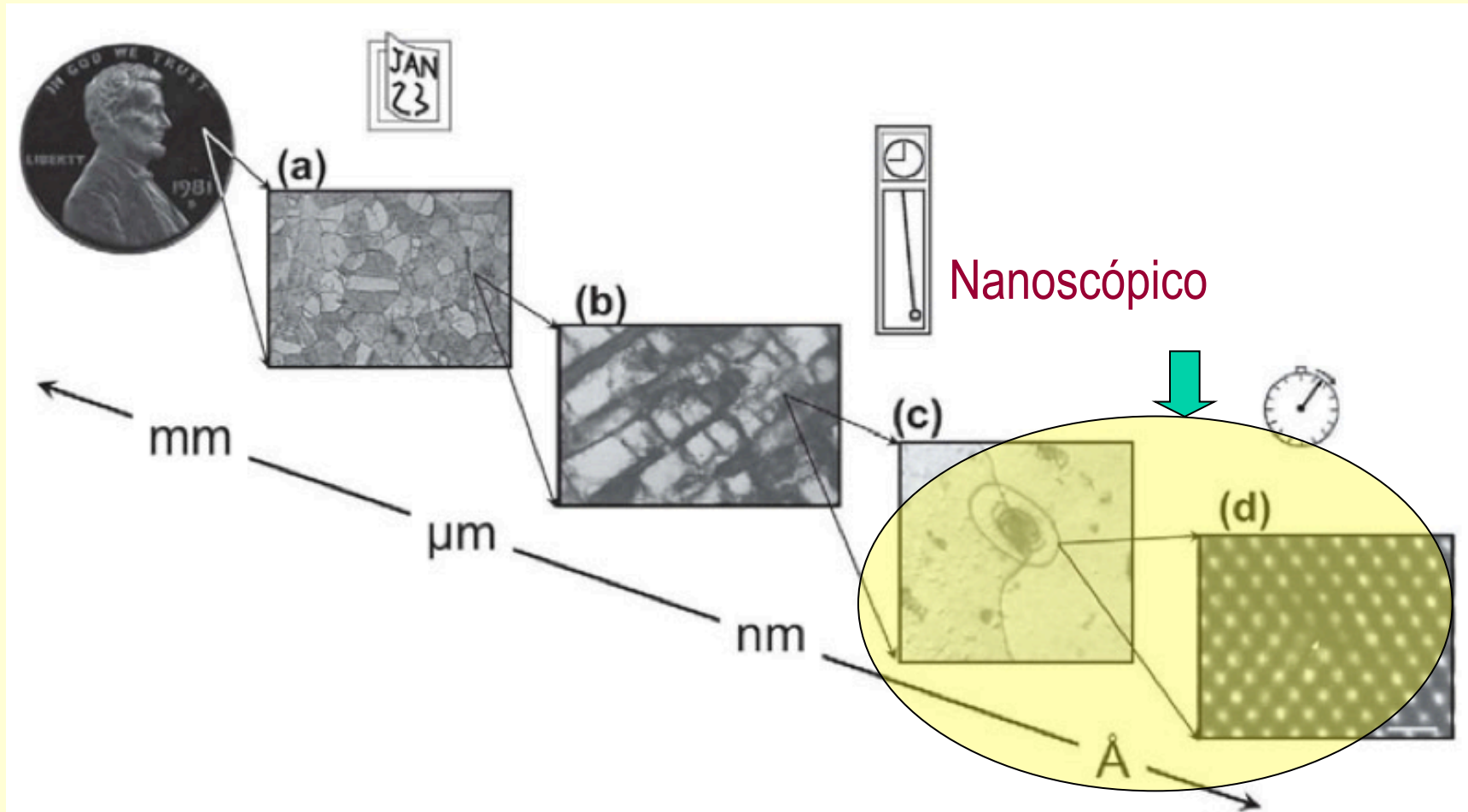
## 4. Perspectivas y Conclusiones

# Materiales según su estado

---



# De lo macroscópico a lo atómico

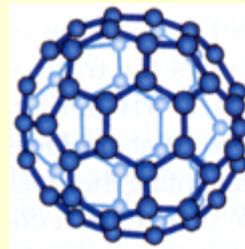




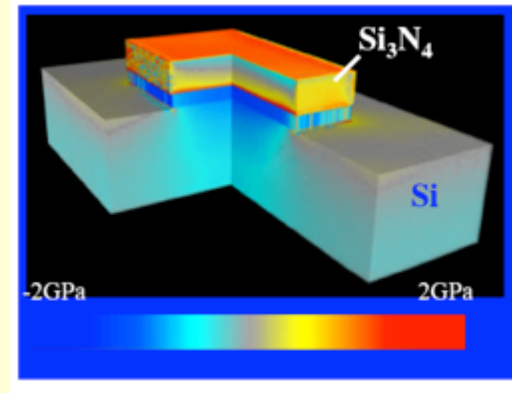
# Investigación Nano Materiales

Pequeñas dimensiones (10-100 nm)

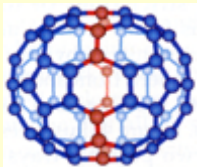
Nanomateriales



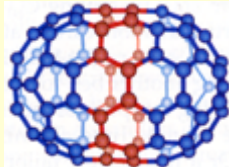
$C_{60}$



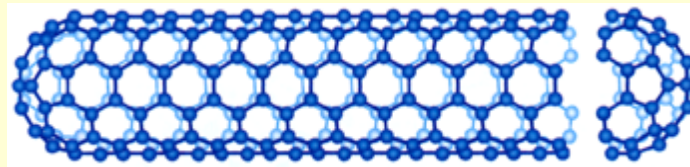
Nanoestructurados.



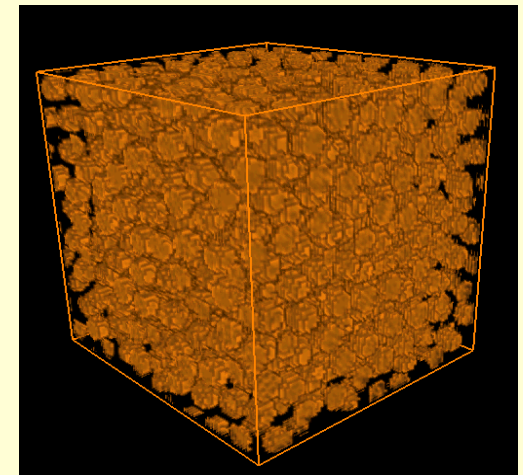
$C_{70}$



$C_{80}$



CNT



Alexander Flemming

# Materiales a la medida





---

¿Es posible diseñar y construir un material que tenga la dureza del diamante, que sea conductor de electricidad, liviano y de color amarillo?

# Tabla Periódica de los Elementos

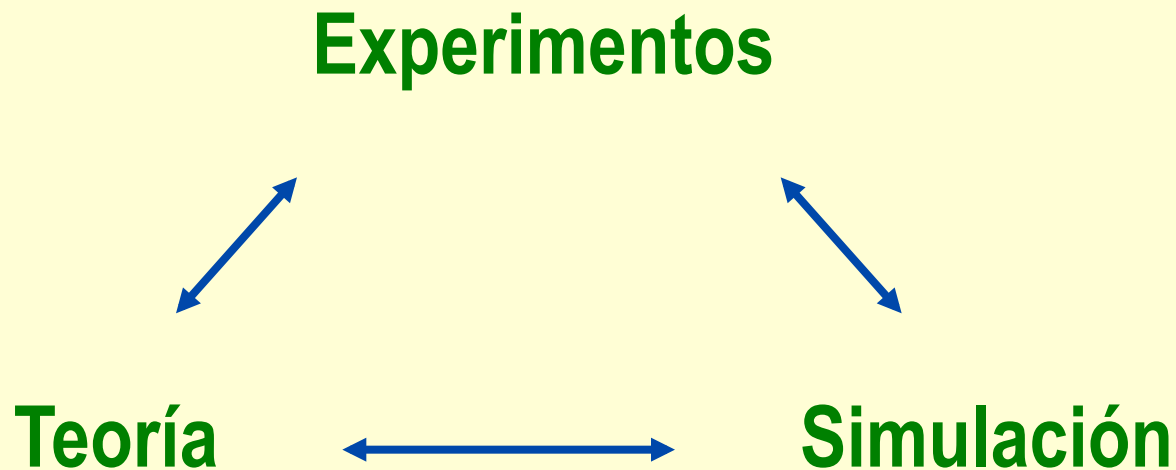
<b>H</b> <sup>1</sup>																	<b>He</b> <sup>2</sup>
<b>Li</b> <sup>3</sup>	<b>Be</b> <sup>4</sup>											<b>B</b> <sup>5</sup>	<b>C</b> <sup>6</sup>	<b>N</b> <sup>7</sup>	<b>O</b> <sup>8</sup>	<b>F</b> <sup>9</sup>	<b>Ne</b> <sup>10</sup>
<b>Na</b> <sup>11</sup>	<b>Mg</b> <sup>12</sup>											<b>Al</b> <sup>13</sup>	<b>Si</b> <sup>14</sup>	<b>P</b> <sup>15</sup>	<b>S</b> <sup>16</sup>	<b>Cl</b> <sup>17</sup>	<b>Ar</b> <sup>18</sup>
<b>K</b> <sup>19</sup>	<b>Ca</b> <sup>20</sup>	<b>Sc</b> <sup>21</sup>	<b>Ti</b> <sup>22</sup>	<b>V</b> <sup>23</sup>	<b>Cr</b> <sup>24</sup>	<b>Mn</b> <sup>25</sup>	<b>Fe</b> <sup>26</sup>	<b>Co</b> <sup>27</sup>	<b>Ni</b> <sup>28</sup>	<b>Cu</b> <sup>29</sup>	<b>Zn</b> <sup>30</sup>	<b>Ga</b> <sup>31</sup>	<b>Ge</b> <sup>32</sup>	<b>As</b> <sup>33</sup>	<b>Se</b> <sup>34</sup>	<b>Br</b> <sup>35</sup>	<b>Kr</b> <sup>36</sup>
<b>Rb</b> <sup>37</sup>	<b>Sr</b> <sup>38</sup>	<b>Y</b> <sup>39</sup>	<b>Zr</b> <sup>40</sup>	<b>Nb</b> <sup>41</sup>	<b>Mo</b> <sup>42</sup>	<b>Tc</b> <sup>43</sup>	<b>Ru</b> <sup>44</sup>	<b>Rh</b> <sup>45</sup>	<b>Pd</b> <sup>46</sup>	<b>Ag</b> <sup>47</sup>	<b>Cd</b> <sup>48</sup>	<b>In</b> <sup>49</sup>	<b>Sn</b> <sup>50</sup>	<b>Sb</b> <sup>51</sup>	<b>Te</b> <sup>52</sup>	<b>I</b> <sup>53</sup>	<b>Xe</b> <sup>54</sup>
<b>Cs</b> <sup>55</sup>	<b>Ba</b> <sup>56</sup>	<b>La</b> <sup>57</sup>	<b>Hf</b> <sup>72</sup>	<b>Ta</b> <sup>73</sup>	<b>W</b> <sup>74</sup>	<b>Re</b> <sup>75</sup>	<b>Os</b> <sup>76</sup>	<b>Ir</b> <sup>77</sup>	<b>Pt</b> <sup>78</sup>	<b>Au</b> <sup>79</sup>	<b>Hg</b> <sup>80</sup>	<b>Tl</b> <sup>81</sup>	<b>Pb</b> <sup>82</sup>	<b>Bi</b> <sup>83</sup>	<b>Po</b> <sup>84</sup>	<b>At</b> <sup>85</sup>	<b>Rn</b> <sup>86</sup>
<b>Fr</b> <sup>87</sup>	<b>Ra</b> <sup>88</sup>	<b>Ac</b> <sup>89</sup>	<b>Rf</b> <sup>104</sup>	<b>Db</b> <sup>105</sup>	<b>Sg</b> <sup>106</sup>	<b>Bh</b> <sup>107</sup>	<b>Hs</b> <sup>108</sup>	<b>Mt</b> <sup>109</sup>	<b>Uun</b> <sup>110</sup>								

<b>Ce</b> <sup>58</sup>	<b>Pr</b> <sup>59</sup>	<b>Nd</b> <sup>60</sup>	<b>Pm</b> <sup>61</sup>	<b>Sm</b> <sup>62</sup>	<b>Eu</b> <sup>63</sup>	<b>Gd</b> <sup>64</sup>	<b>Tb</b> <sup>65</sup>	<b>Dy</b> <sup>66</sup>	<b>Ho</b> <sup>67</sup>	<b>Er</b> <sup>68</sup>	<b>Tm</b> <sup>69</sup>	<b>Yb</b> <sup>70</sup>	<b>Lu</b> <sup>71</sup>
<b>Th</b> <sup>90</sup>	<b>Pa</b> <sup>91</sup>	<b>U</b> <sup>92</sup>	<b>Np</b> <sup>93</sup>	<b>Pu</b> <sup>94</sup>	<b>Am</b> <sup>95</sup>	<b>Cm</b> <sup>96</sup>	<b>Bk</b> <sup>97</sup>	<b>Cf</b> <sup>98</sup>	<b>Es</b> <sup>99</sup>	<b>Fm</b> <sup>100</sup>	<b>Md</b> <sup>101</sup>	<b>No</b> <sup>102</sup>	<b>Lr</b> <sup>103</sup>

 Metales alcalinos	 Metales alcalinos terrosos	 Metales de transición	 Metales de tierras raras
 Otros metales	 Gases nobles	 haluros	 Otros no metales

# ¿Porqué hoy vemos como posible el poder diseñar materiales a la medida?

---



**Herramientas teóricas:**

**Mecánica cuántica**

---

# Física del siglo XIX

---

## Mecánica clásica

- Acústica
- Leyes del movimiento
- Teoría Gravitación
- Mecánica de Fluidos

## Electrodinámica

- Electricidad
- Magnetismo
- Ondas electromagnéticas

## Termodinámica

- Tres leyes de la Termodinámica
- Mecánica Estadística

# Dos nubes en el horizonte

Comienzos del 1900:

Contradicción  
entre la  
Mecánica y la  
Electrodinámica



Nuevos  
fenómenos (a  
nivel atómico)  
sin explicación



# Mecánica Cuántica

---



Esta es una teoría sobre el funcionamiento de los átomos y de los fenómenos a nivel atómico, y junto con la teoría de la relatividad, es la creación más grande de la física en el siglo XX.

Heisenberg, Born, Schrödinger, Jordan, Dirac, Pauli, entre otros inventaron la Mecánica Cuántica como la conocemos hoy, entre los años 1925-1928.

Ecuación de Schrödinger  
1926.

$$-i\hbar \frac{\partial |\Phi\rangle}{\partial t} = H |\Phi\rangle$$



## Herramientas experimentales

**microscopio de efecto túnel,  
microscopio de fuerza atómica,  
etc.**

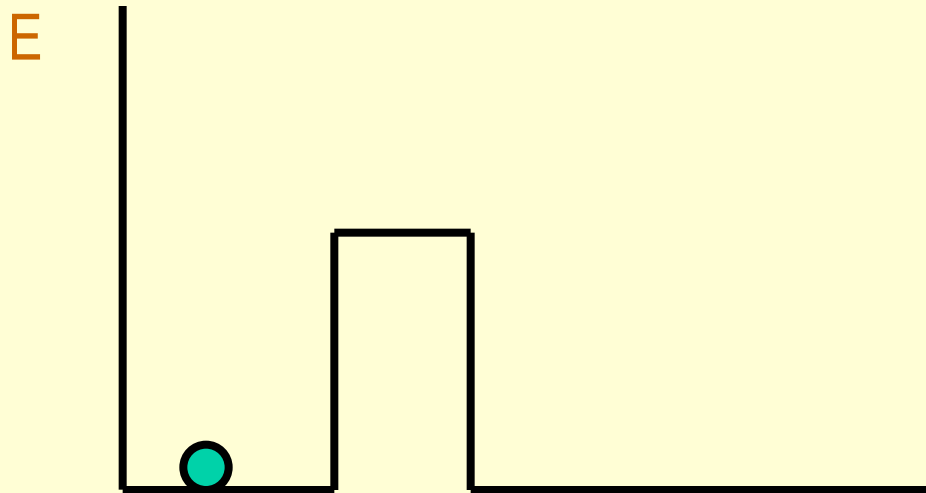
---

# Efecto túnel

---

Clásicamente, una partícula no puede atravesar una muralla

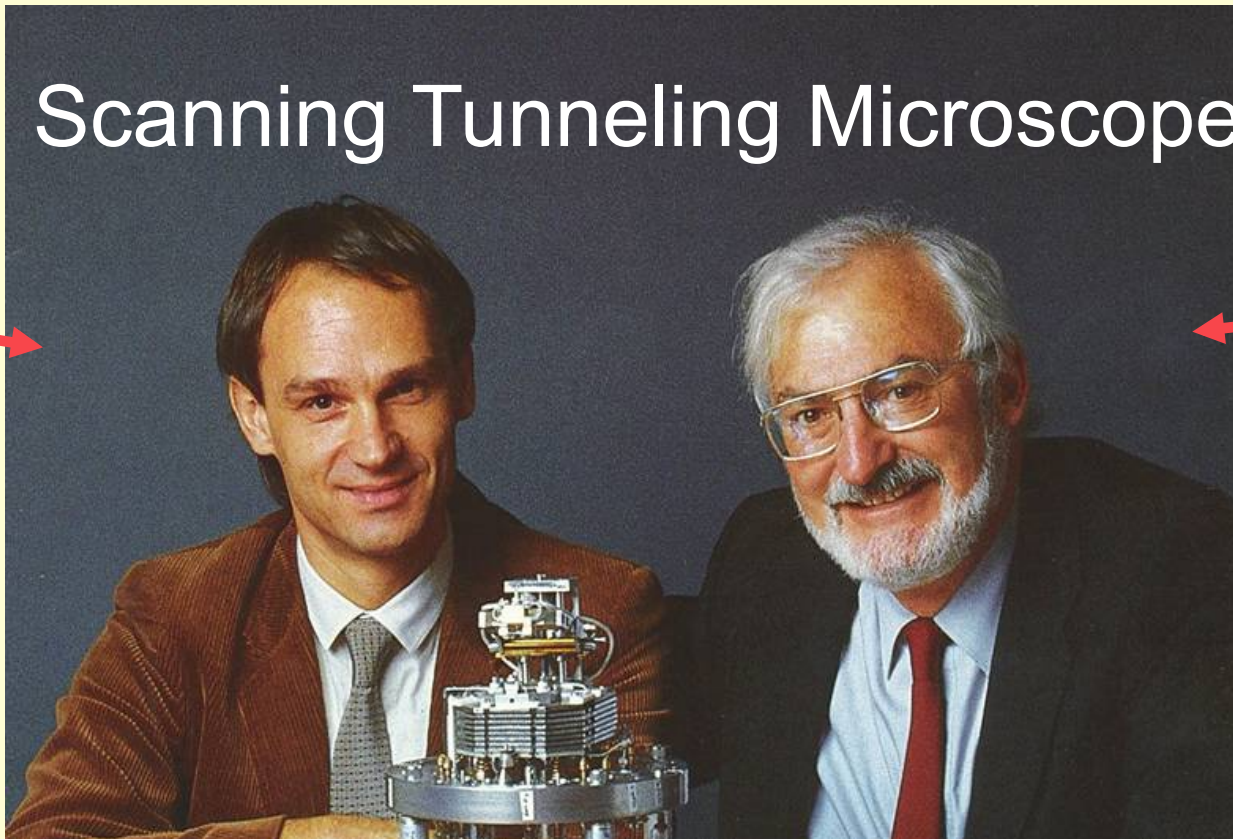
Cuánticamente ¡sí!



## Experimento: Microscopio de efecto Túnel

### Scanning Tunneling Microscope

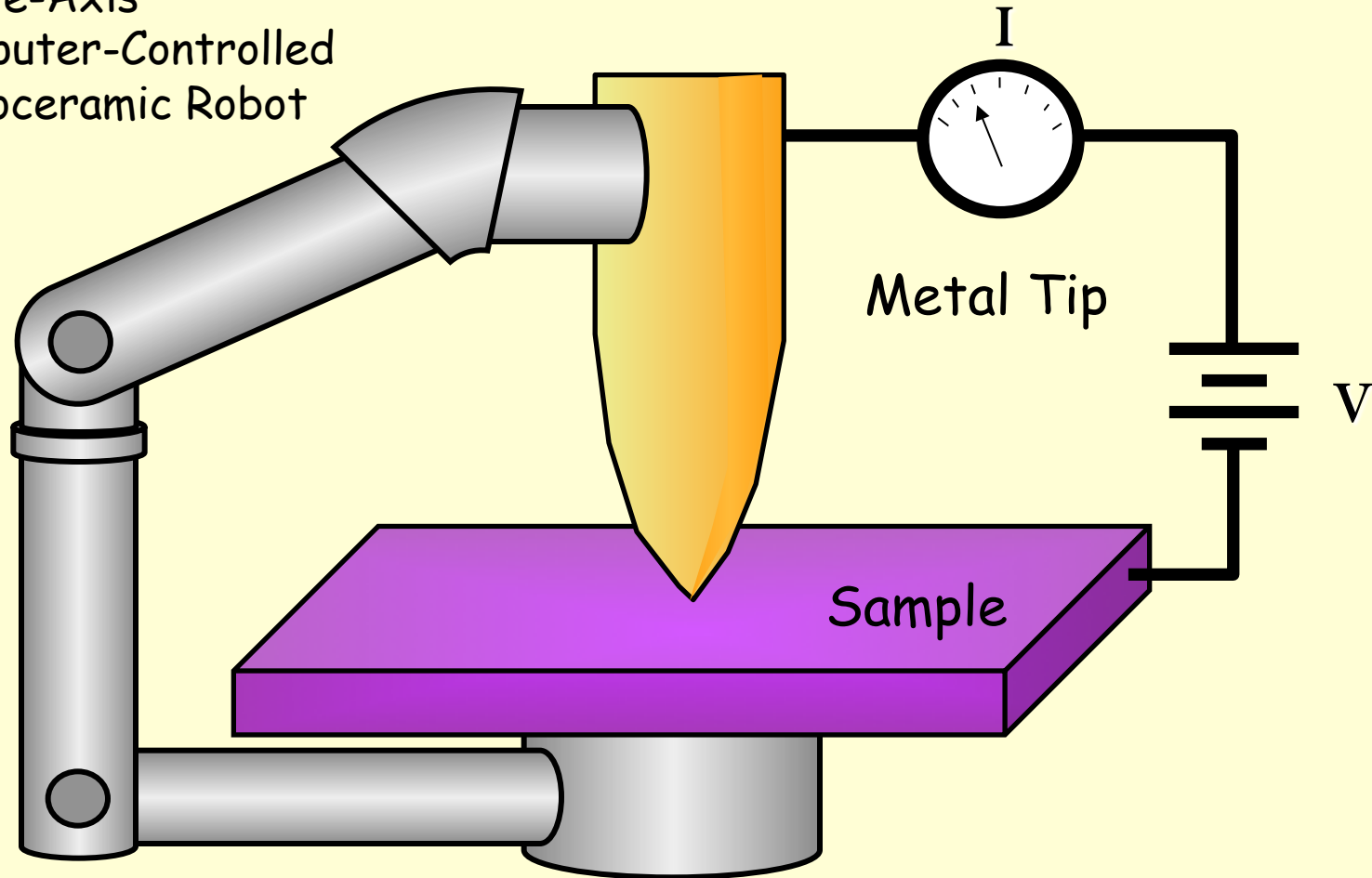
Gerd



Heini

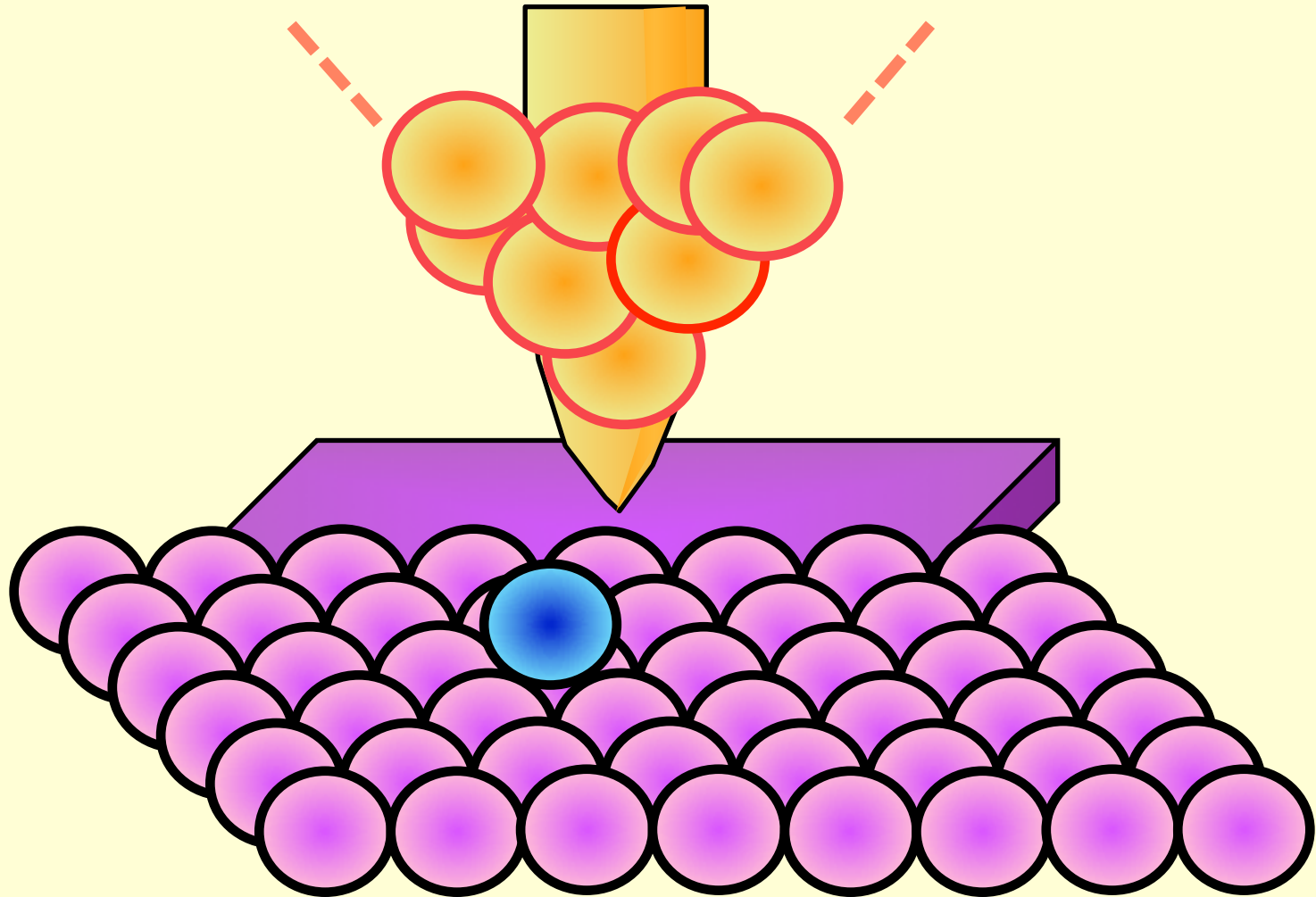
- ▲ Inventado por Gerd Binnig y Heinrich Rohrer, IBM Research Division
- ▲ Permite imágenes de superficies a nivel atómico
- ▲ 1986 Premio Nobel de Física

Triple-Axis  
Computer-Controlled  
Piezoceramic Robot



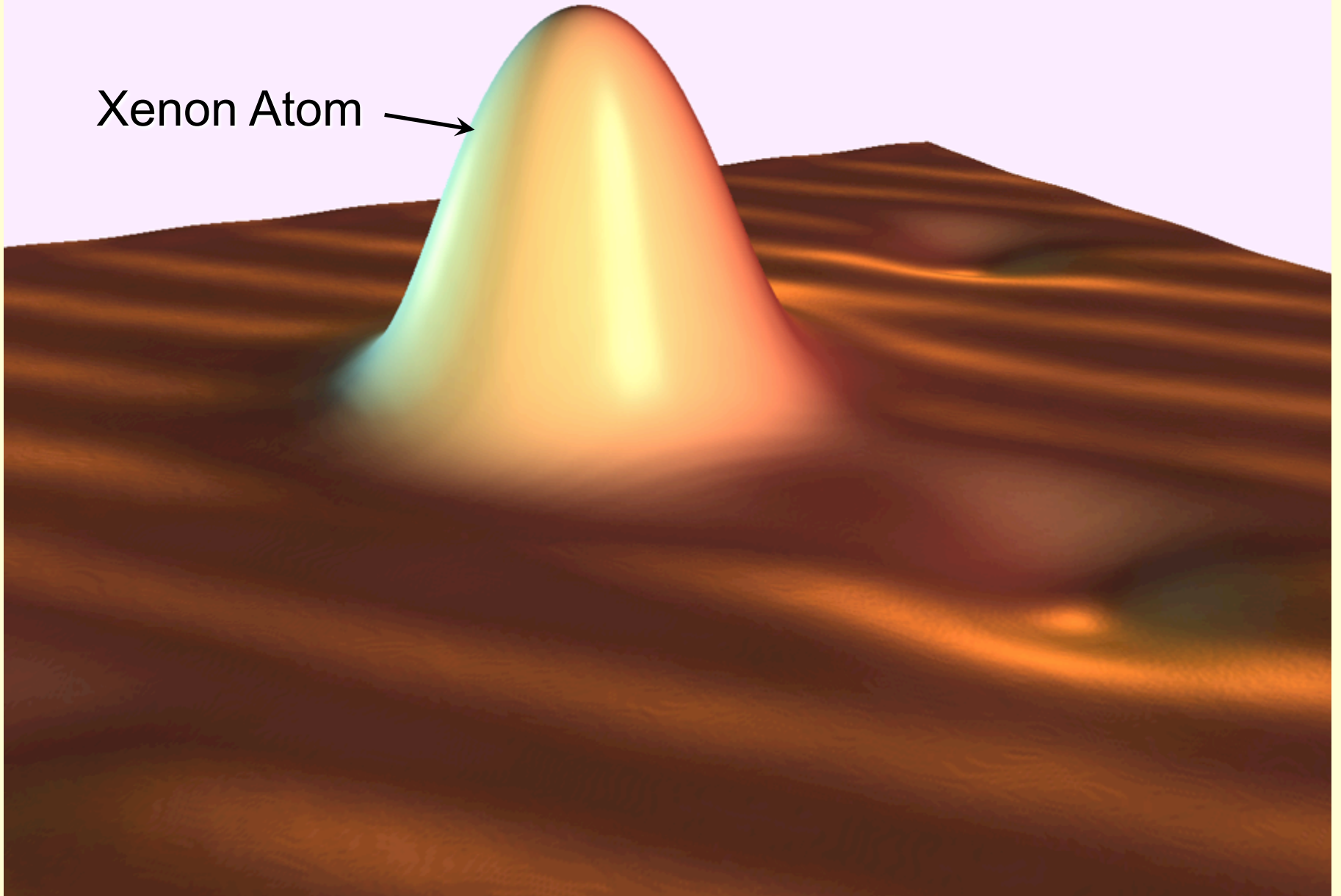
# Scanning Tunneling Microscope

# Modo imagen

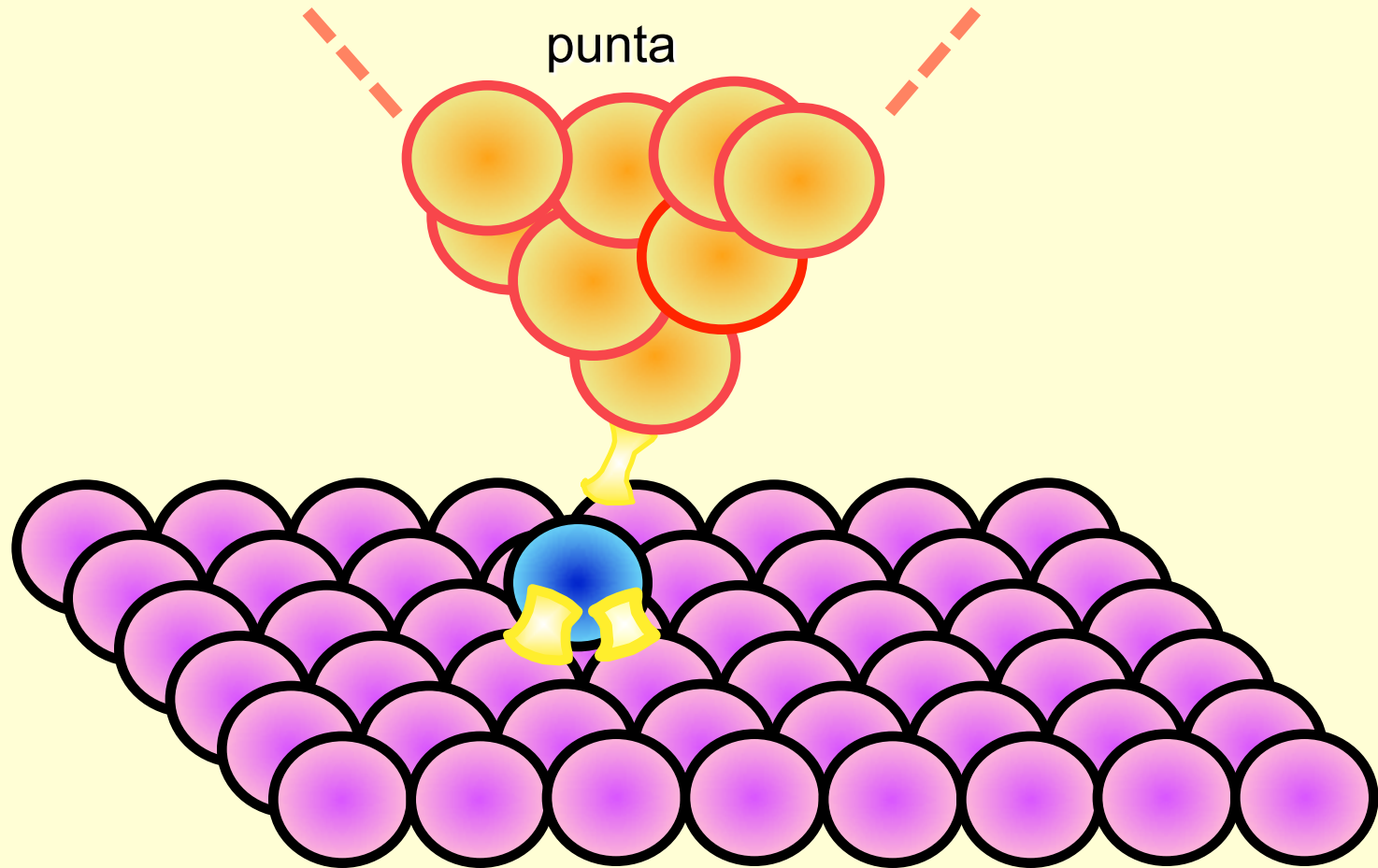


# Atomic Resolution Images of Surfaces

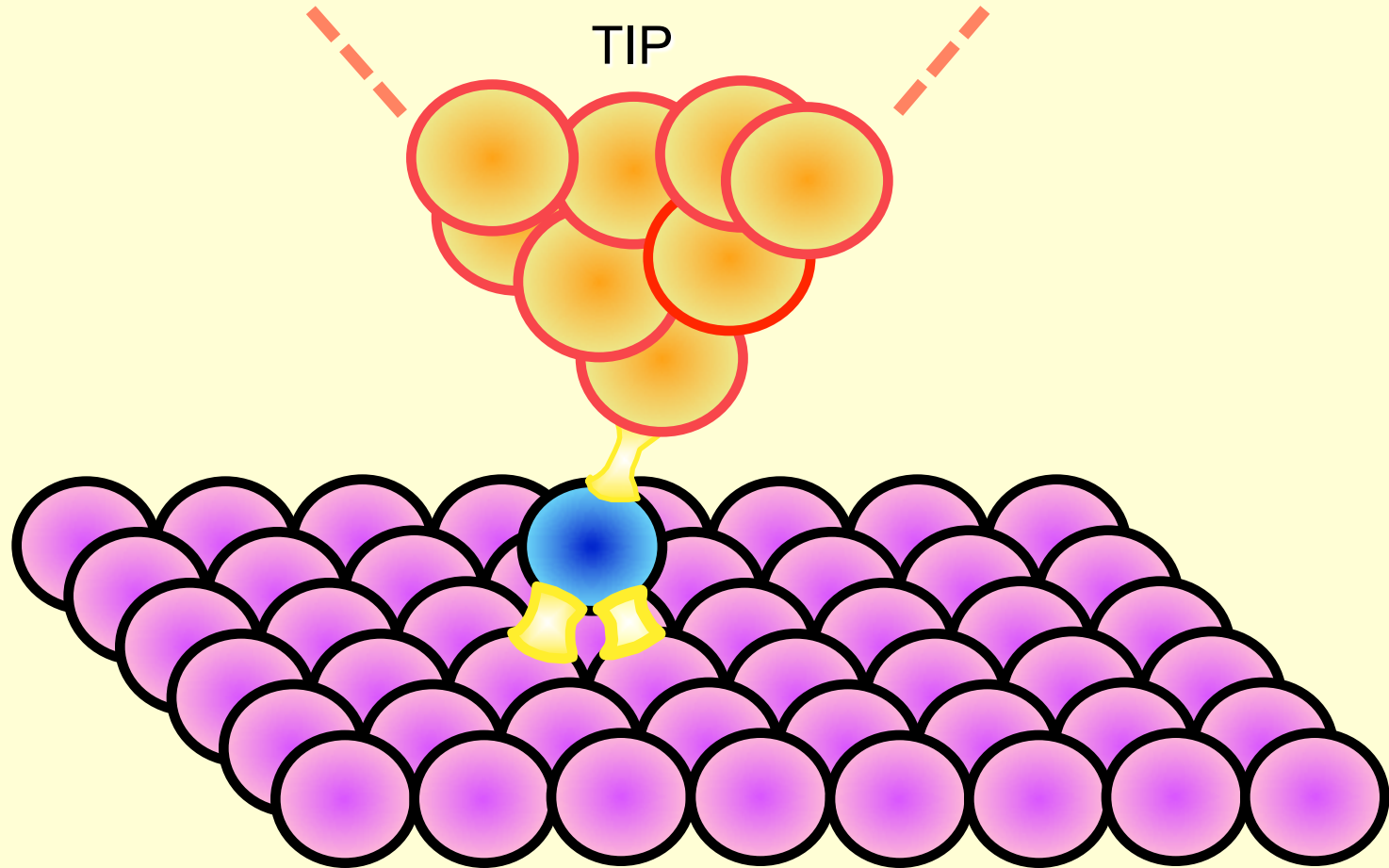
Xenon Atom



# Modo manipulación atómica

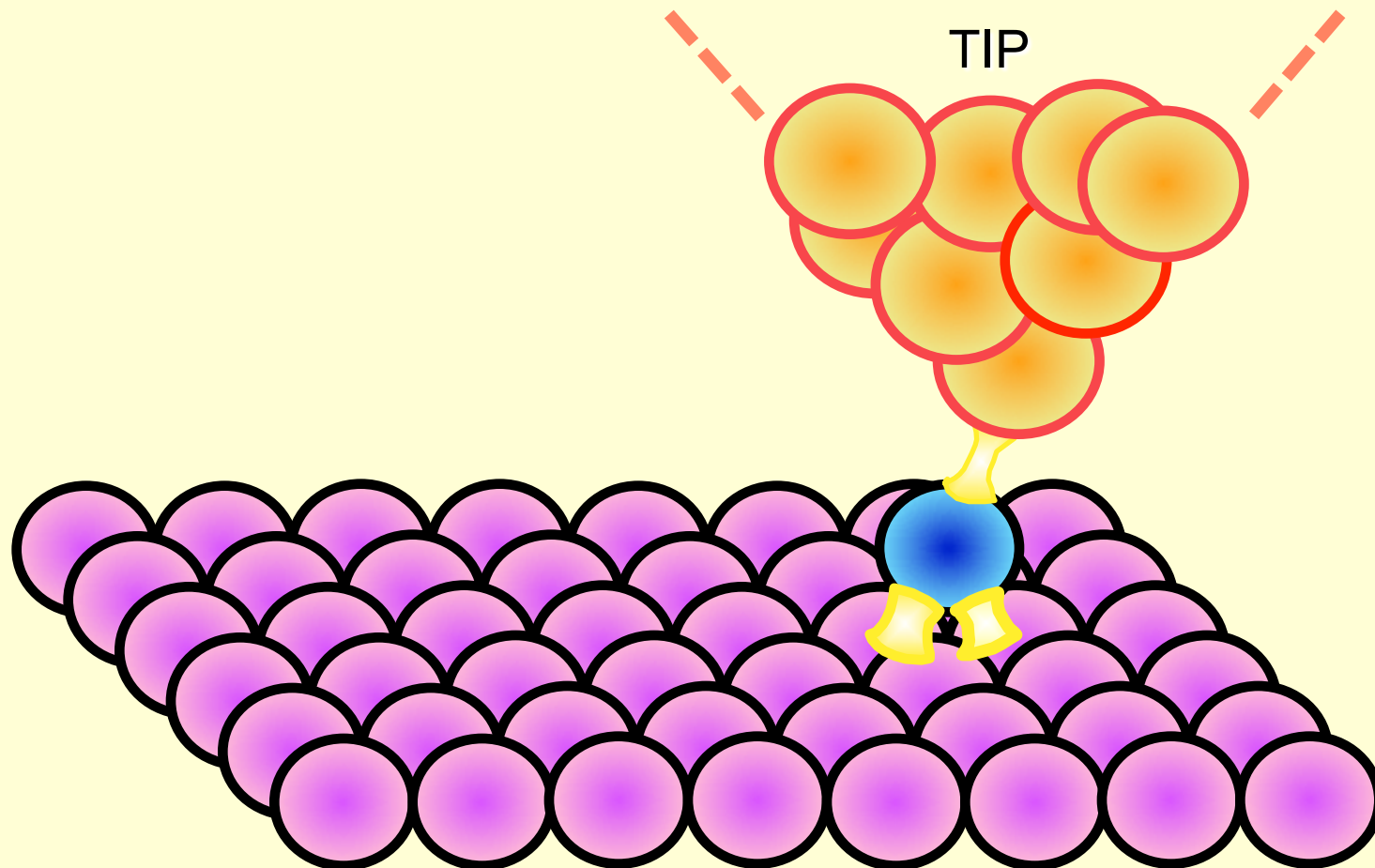


# Manipulación atómica



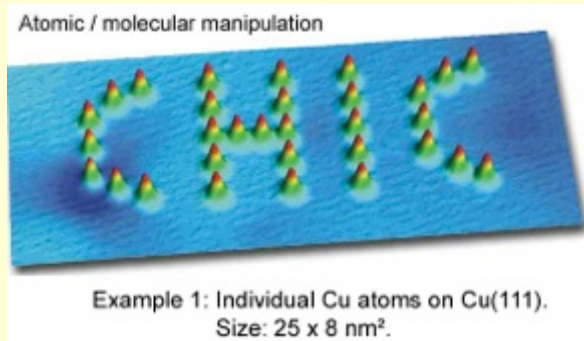


# Manipulación atómica

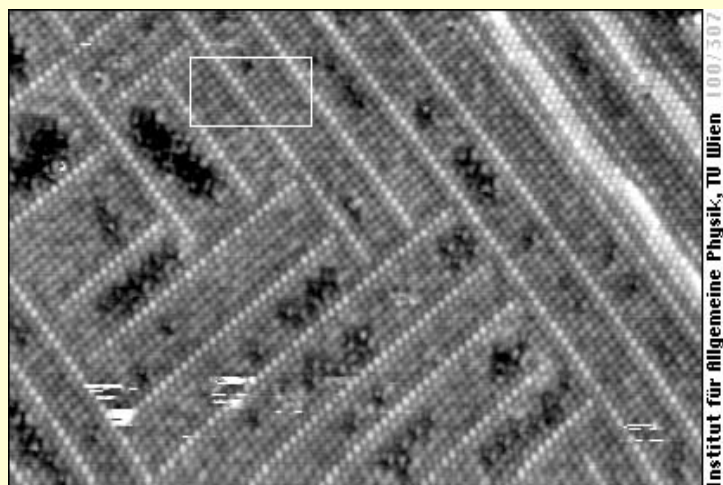


D.M. Eigler and E.K. Schweizer, *Nature* **344**, 524 (1990)

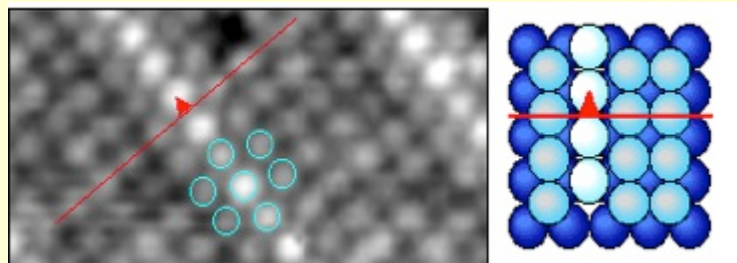
# Construcción “Bottom-up”



Avances experimentales han permitido construir estructuras partiendo directamente de los átomos



Platino sobre níquel: mediante STM se observa que hay reconstrucción de la superficie libre de Platino.



¿Se puede prever eso a partir de los átomos de Pt y Ni y las leyes de la Mec. Cuántica? Ese es nuestro objetivo

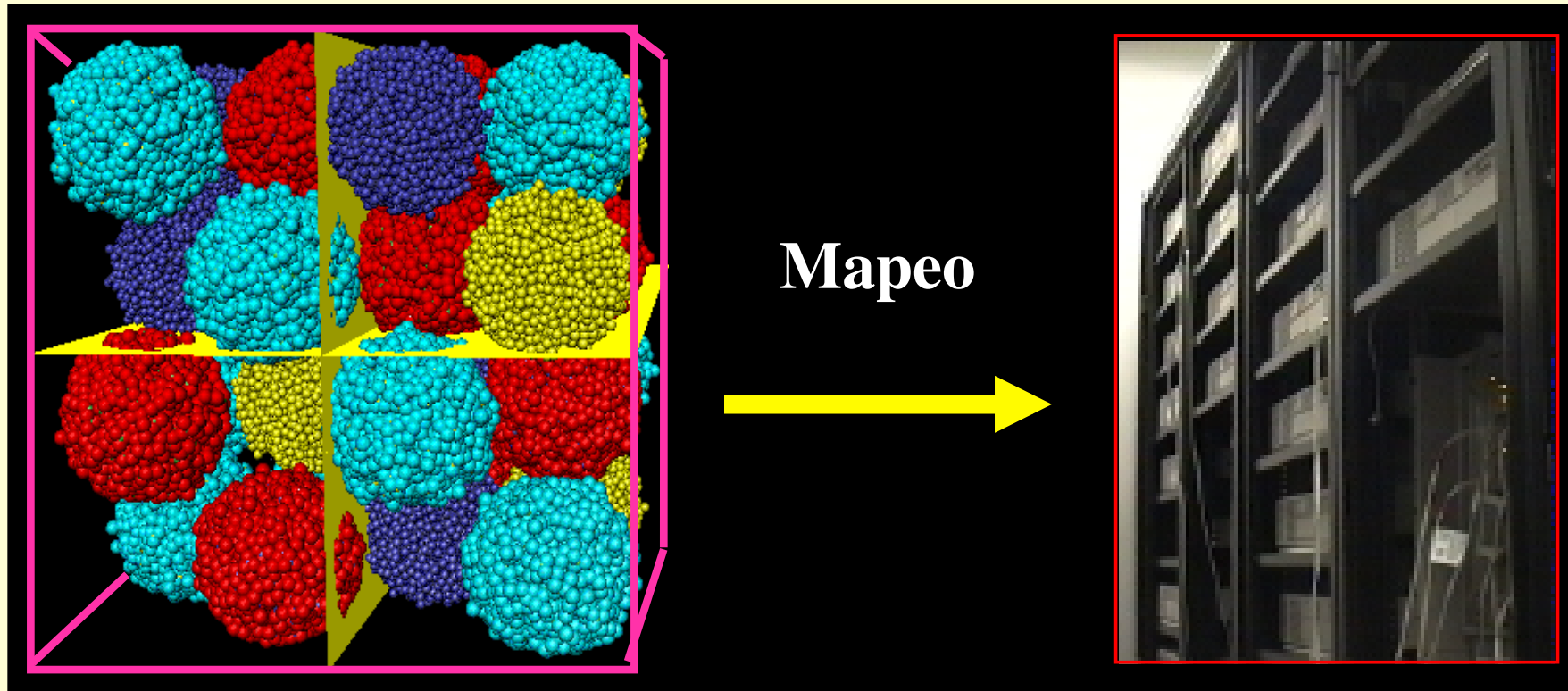
**Herramientas de simulación computacional**

**método de dinámica molecular,  
montecarlo,  
cálculos de estructura electrónica, etc**

---

# Simulación computacional de Nanomateriales

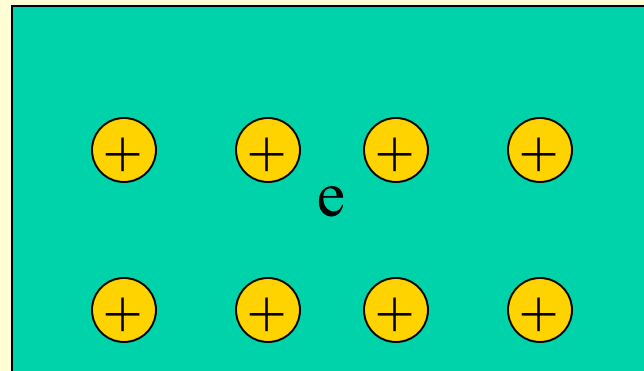
---



# Simulación Computacional

---

El sólido se considera formado por iones positivos y electrones



Para conocer el movimiento de los electrones usamos mecánica cuántica

Para conocer el movimiento de los iones usamos mecánica clásica  
Leyes de Newton

# 1. Efectos de impurezas en Cobre

## Determinación de Propiedades Mecánicas de Productos de Cobre



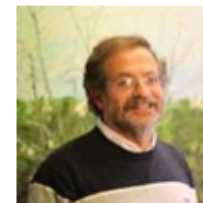
Proyecto CODELCO-IM2 36-11  
Responsable de Proyecto: M. Ignat

Marzo 2012

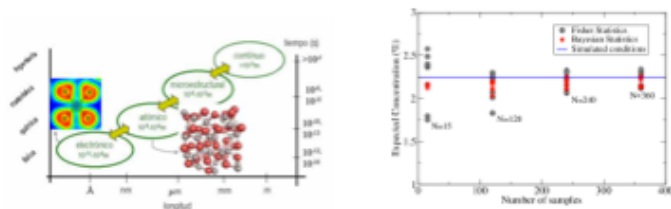
- Miguel Ignat: Análisis propiedades mecánicas
  - Docteur Ingenieur (1977), Docteur en-Sciences (1983)



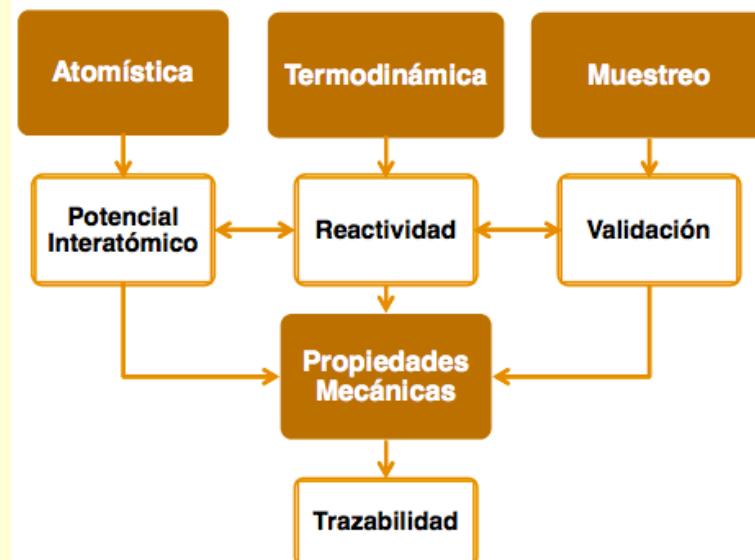
- Álvaro Valencia: Análisis Termodinámico
  - Dr-Ing. Ruhr-Universität Bochum, Alemania, 1993.



- Gonzalo Gutiérrez: Modelización Atómica
  - Doctor en Ciencias con Mención en Física, P. Universidad Católica de Chile, 1997



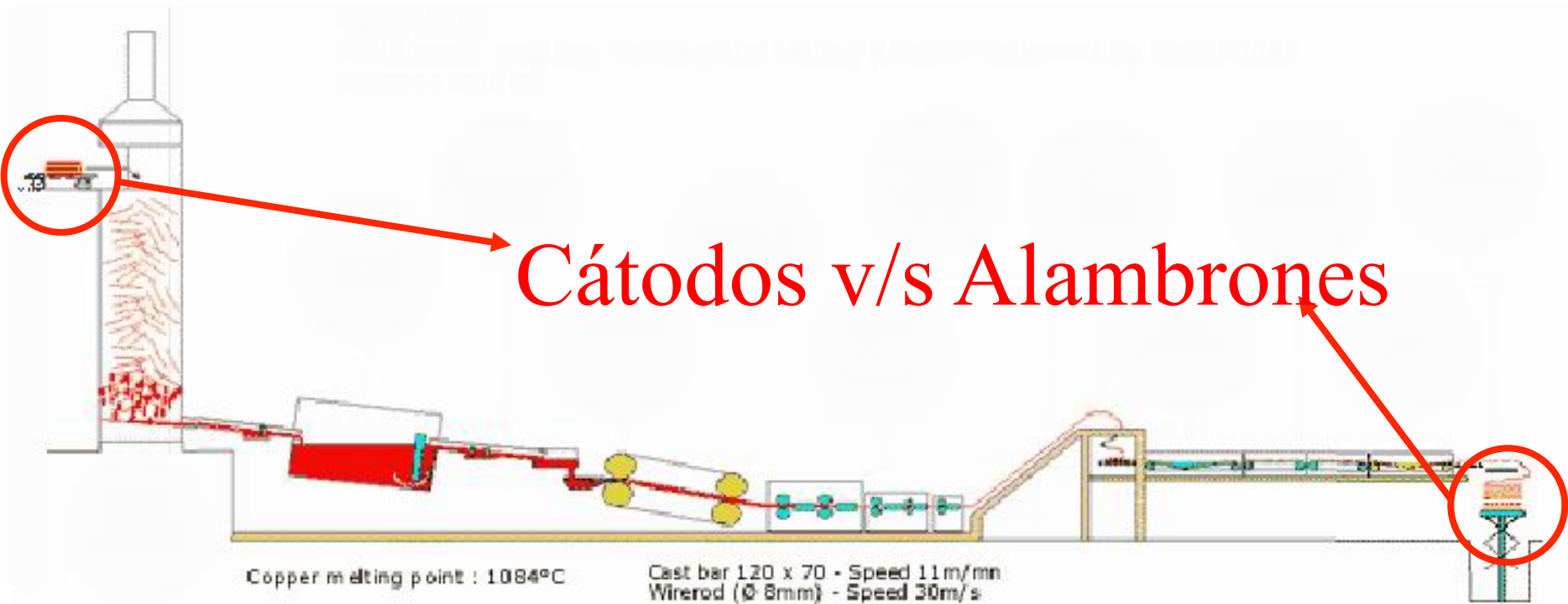
- Sergio Davis: Estadística de Muestreo
  - Ph.D in Applied Material Physics, Royal Institute of Technology (KTH), Estocolmo, Suecia (Septiembre 2009)



Copyrights © 2011 CODELCO-CHILE. Todos los Derechos Reservados. | Copyrights © 2011 by CODELCO-CHILE. All Rights Reserved.

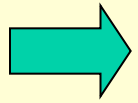


# Cobre “Comercial”: de Cátodos a Alambrones

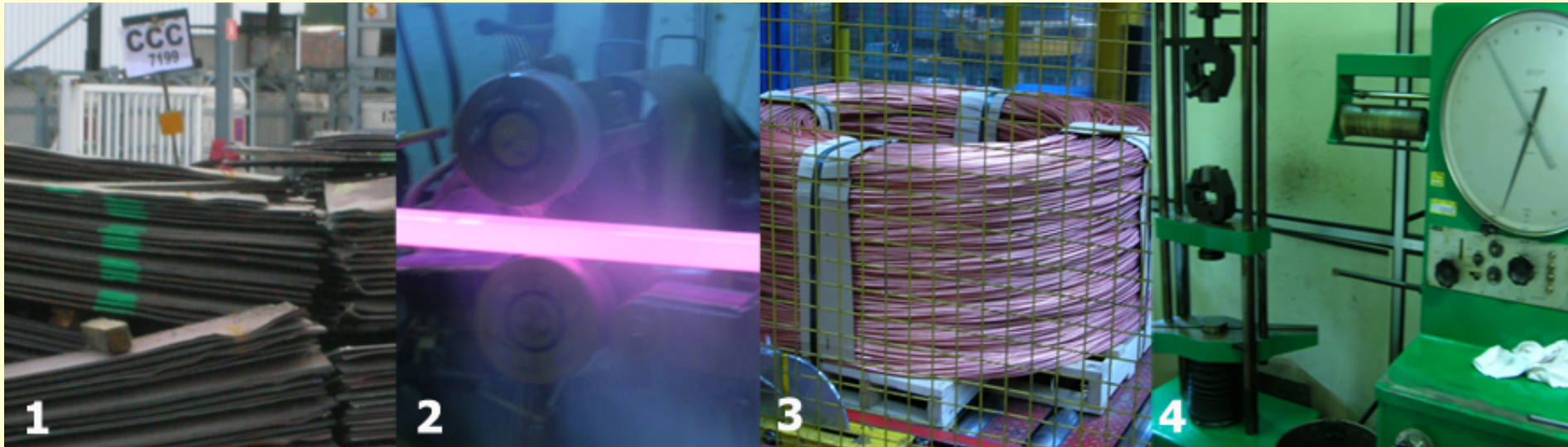


...la Calificación de los **Cátodos (de Chile)** se hace a partir de ensayos mecánicos sobre los **Alambrones (...en el extranjero)**.



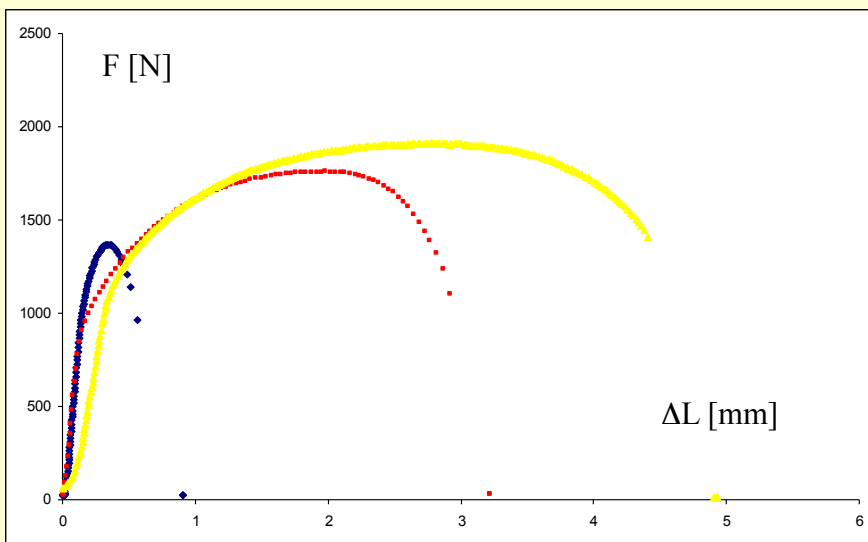
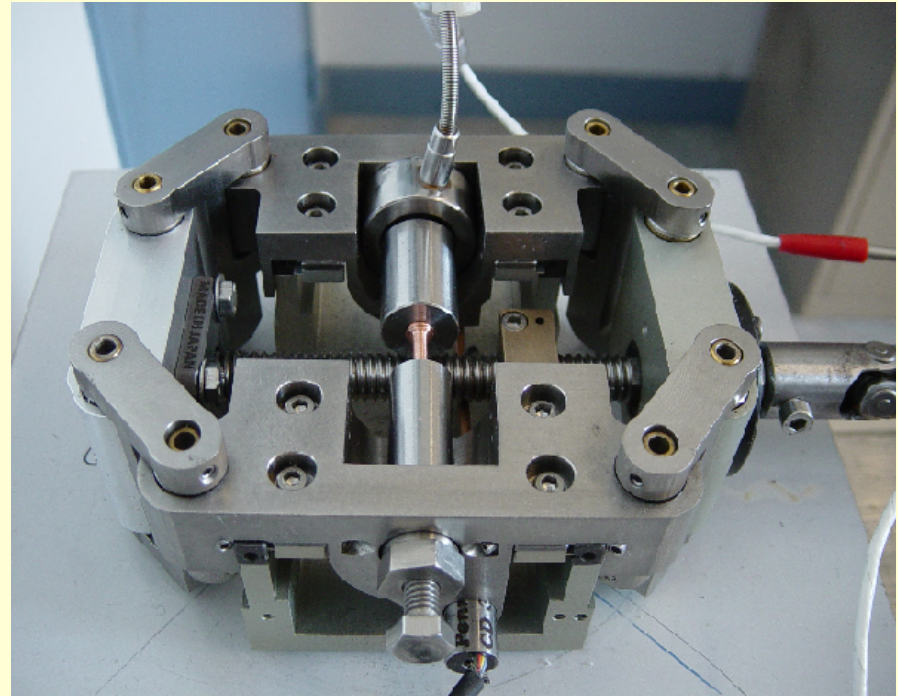
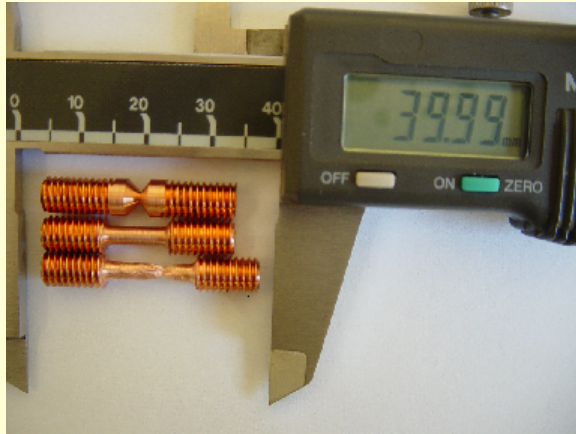


**¿Porqué se fracturan loa alambrones?  
¿Como ingluyen las impurezas en ello?**





# Metodología experimental: tipo de probetas y ensayos



**Normas de Ensayos :**

**Probetas de tracción simples, aplicables tanto a Cables de Catodos como de Alambres.**

**Catalizadores de “fragilización”.**

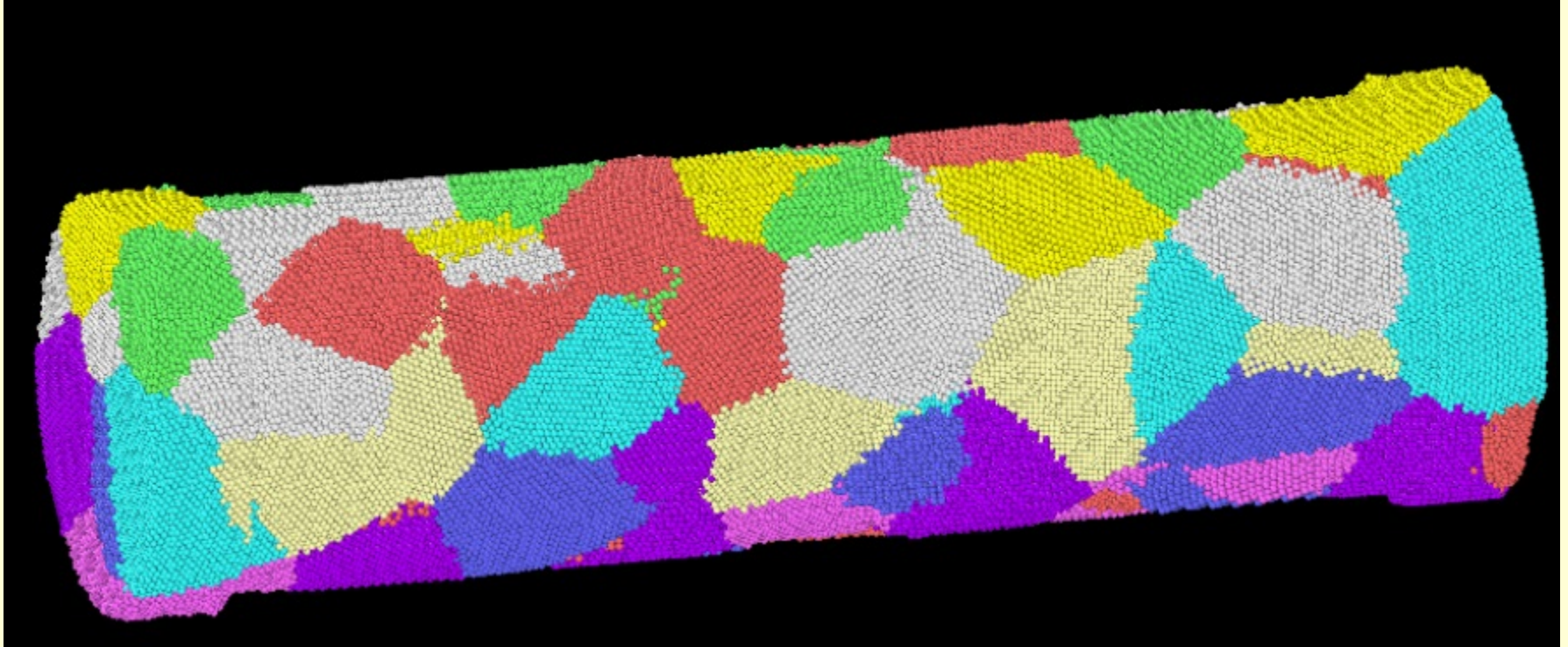
- Velocidad
- Triaxialidad\*
- Temperatura

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

(M. Ignat, 2012)

# Simulación: muestra Cu y Cu-Ag

---



## Sistema 1 Cu puro

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

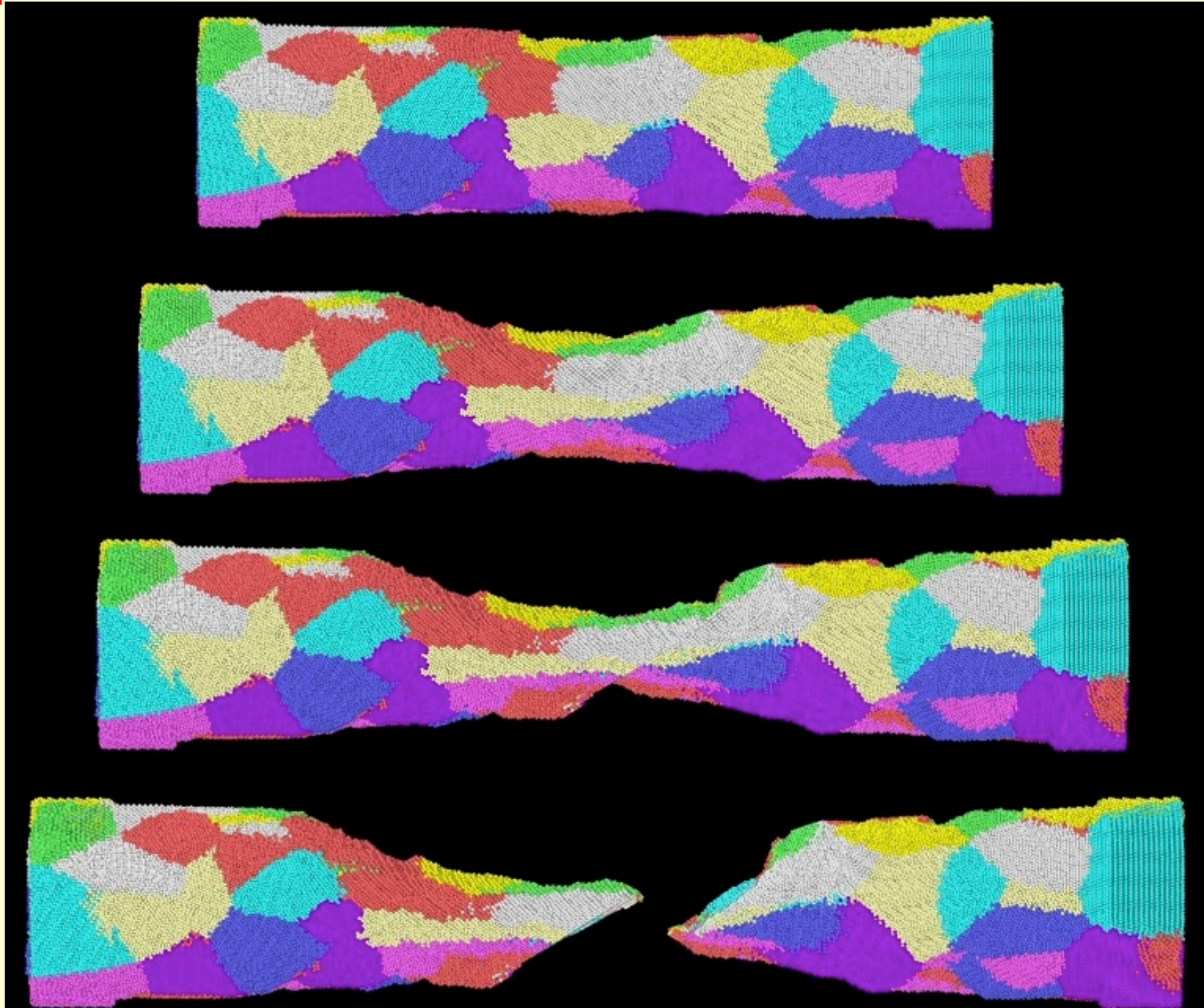
## Sistema 2 Cu-Ag

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

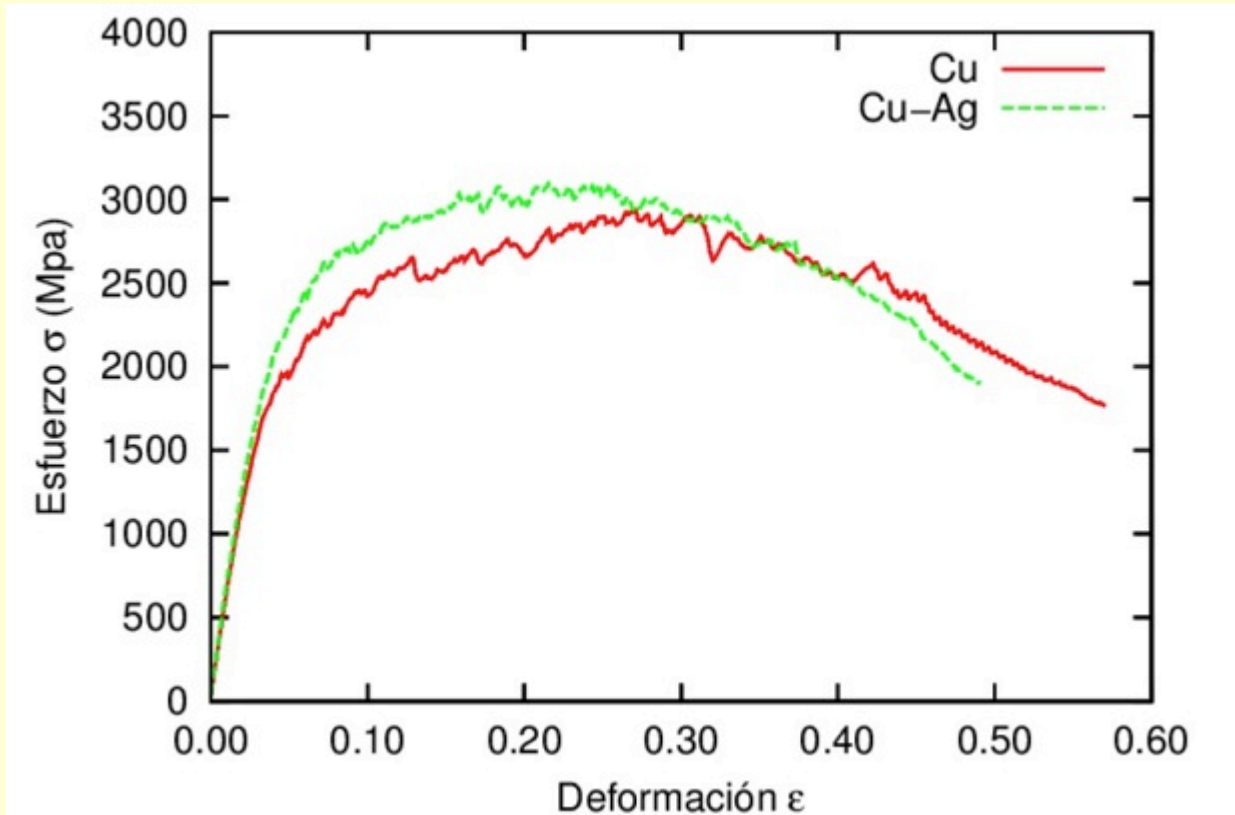


# Fractura:

(Nicolás  
Amigo  
2013.)

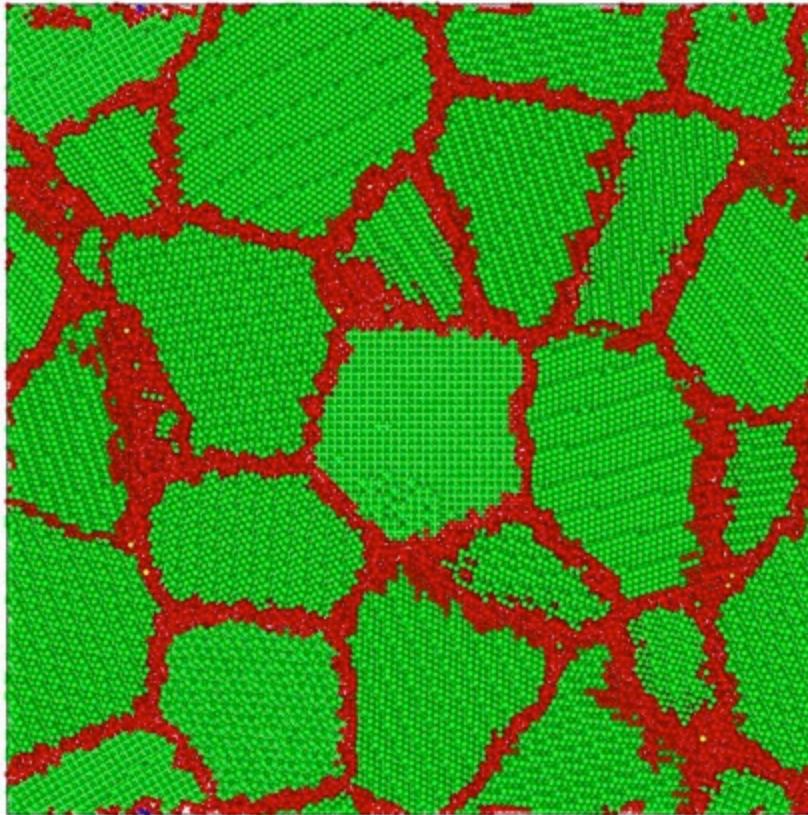


# Curva esfuerzo-deformación

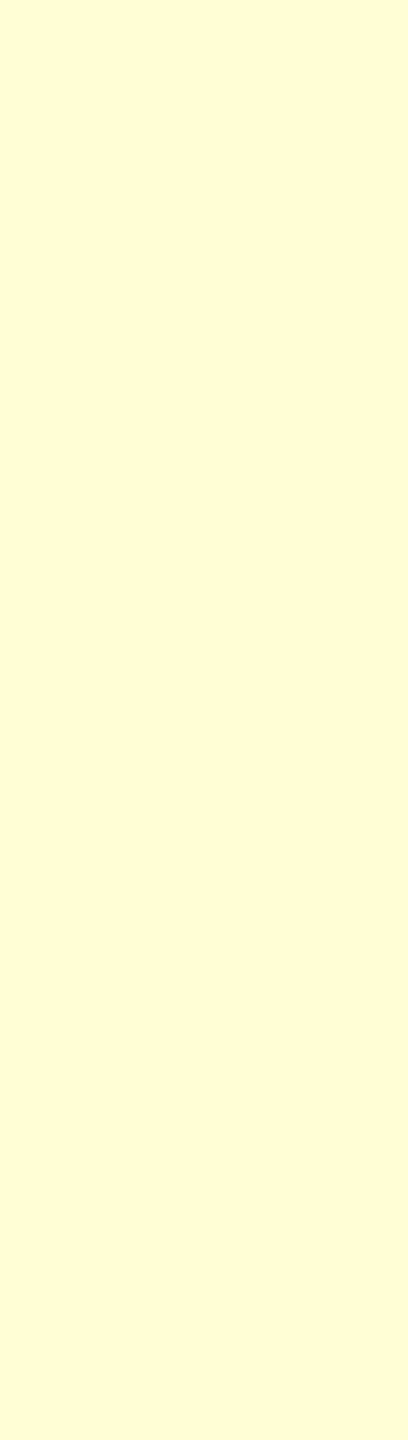
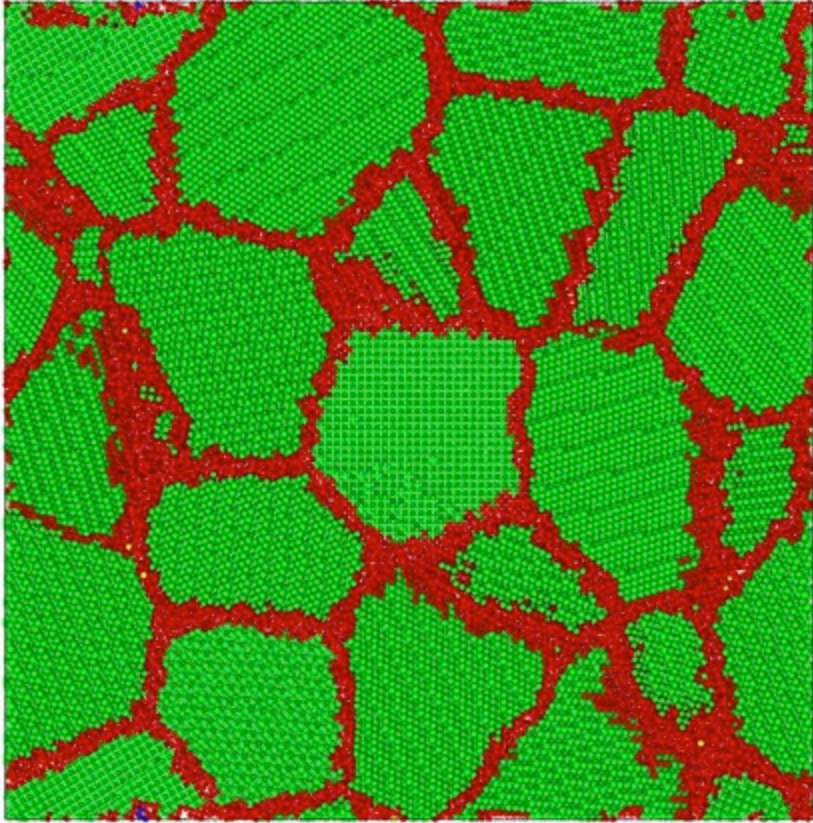


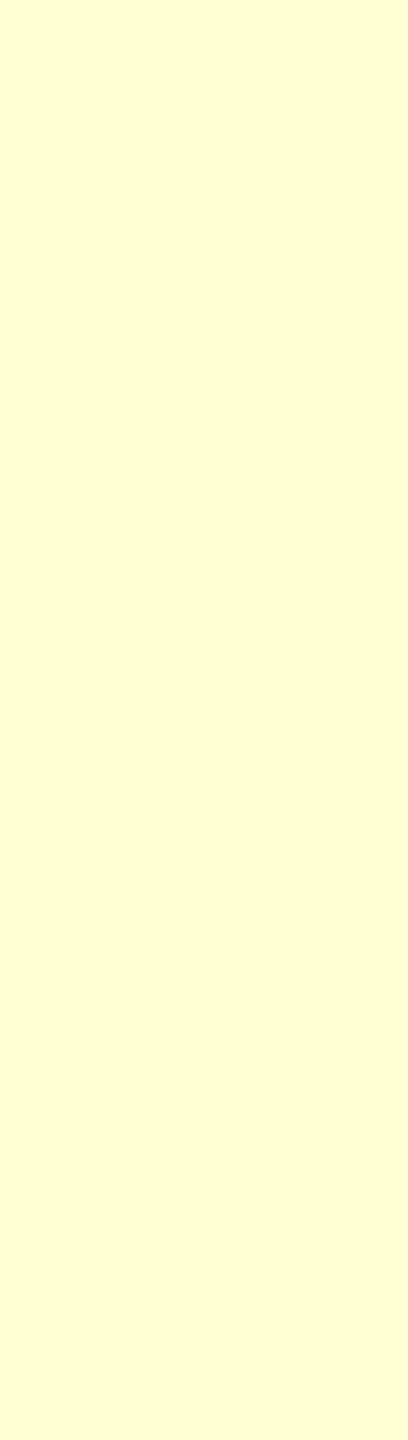
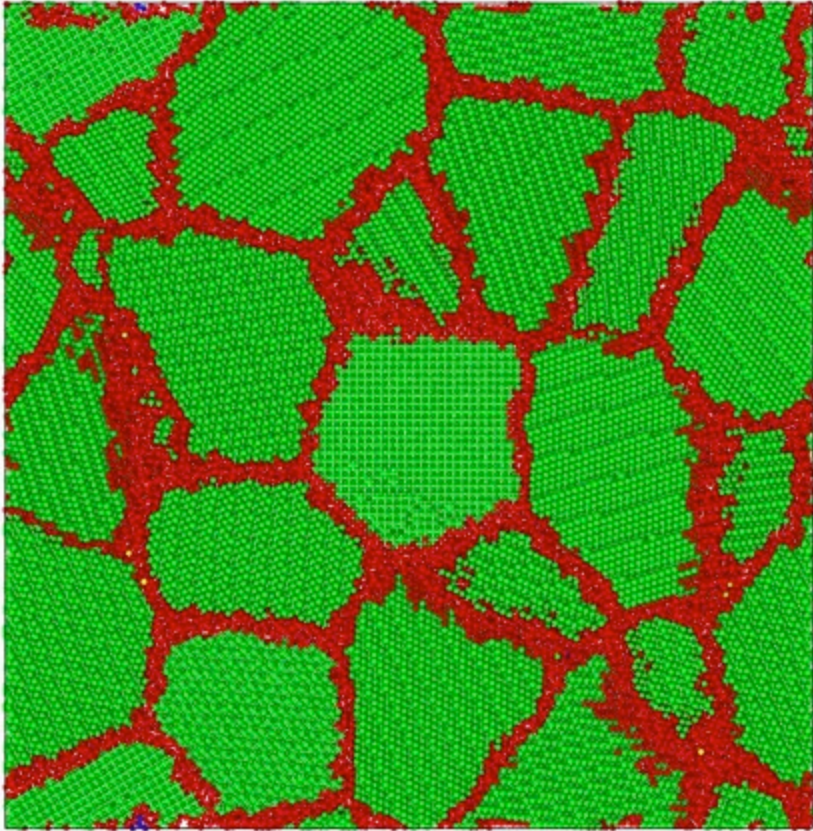
Composición	E [GPa]	$\sigma_{\text{elas}}$ [MPa]	$\sigma_{\text{ult}}$ [MPa]	$\sigma_f$ [MPa]	$\epsilon_f$
Cu	62.4	1292.7	2924.3	1740.3	0.57
Cu-Ag	67.4	1464.9	3081.4	1876.5	0.49

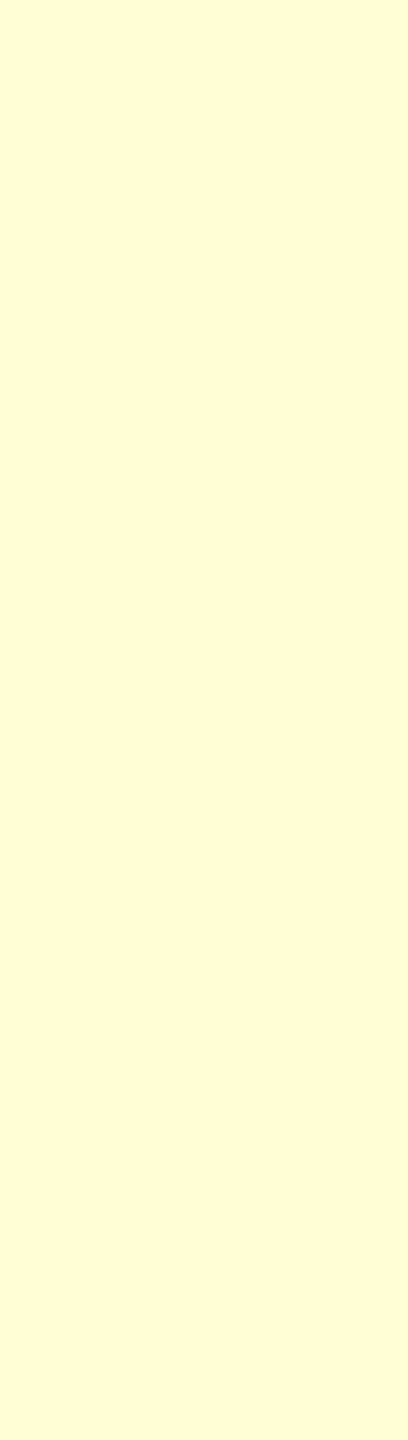
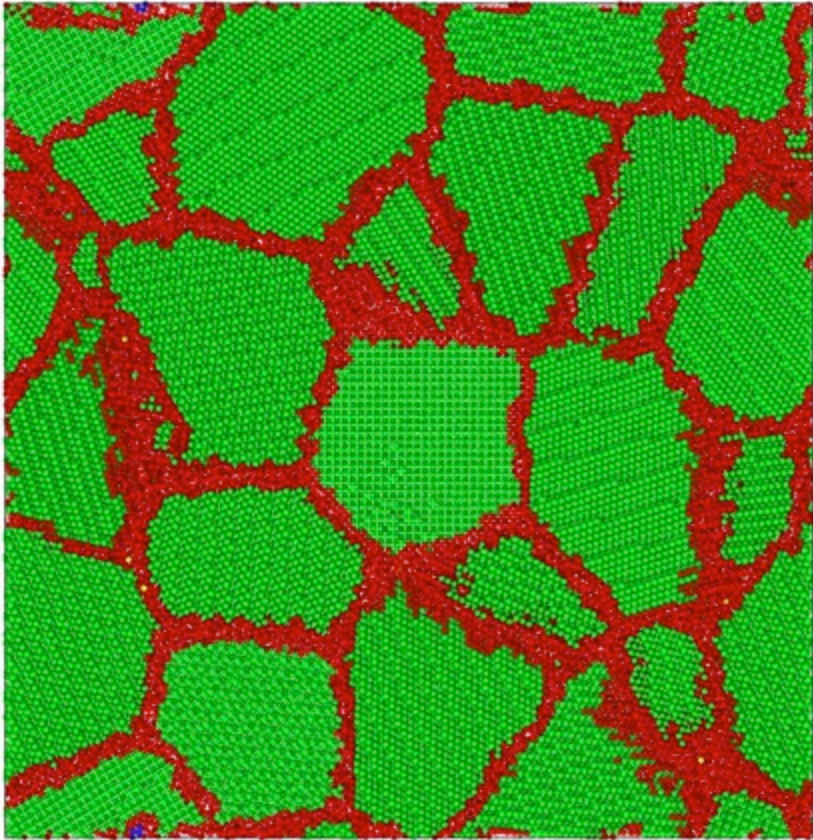
¿que ocurre a nivel atómico?



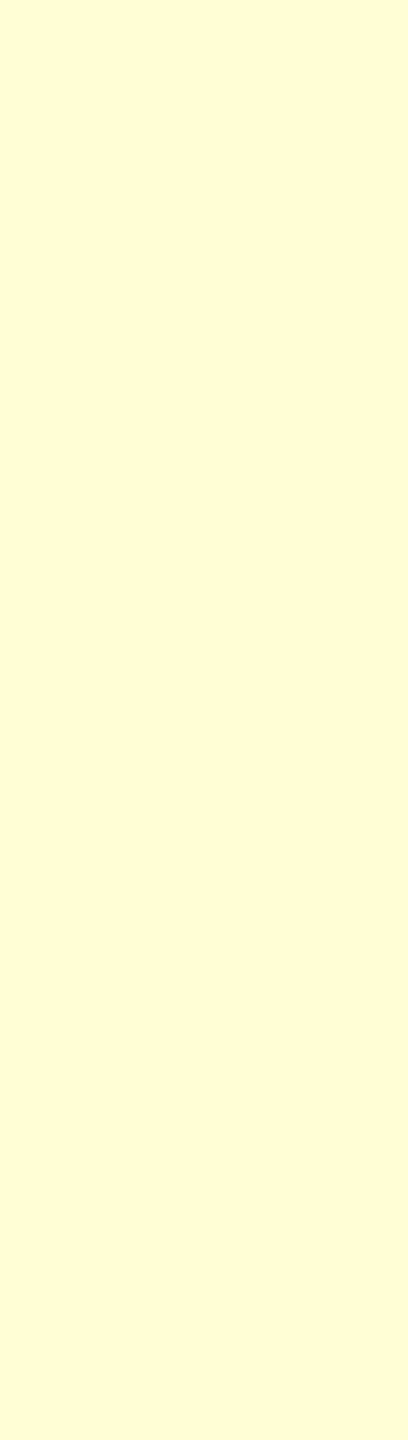
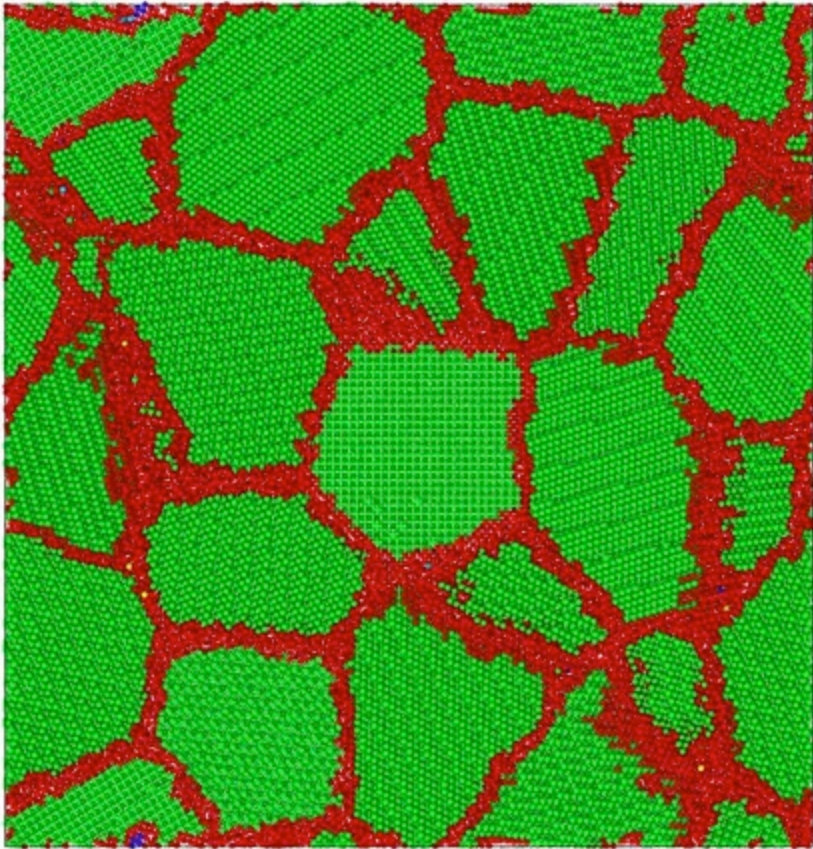


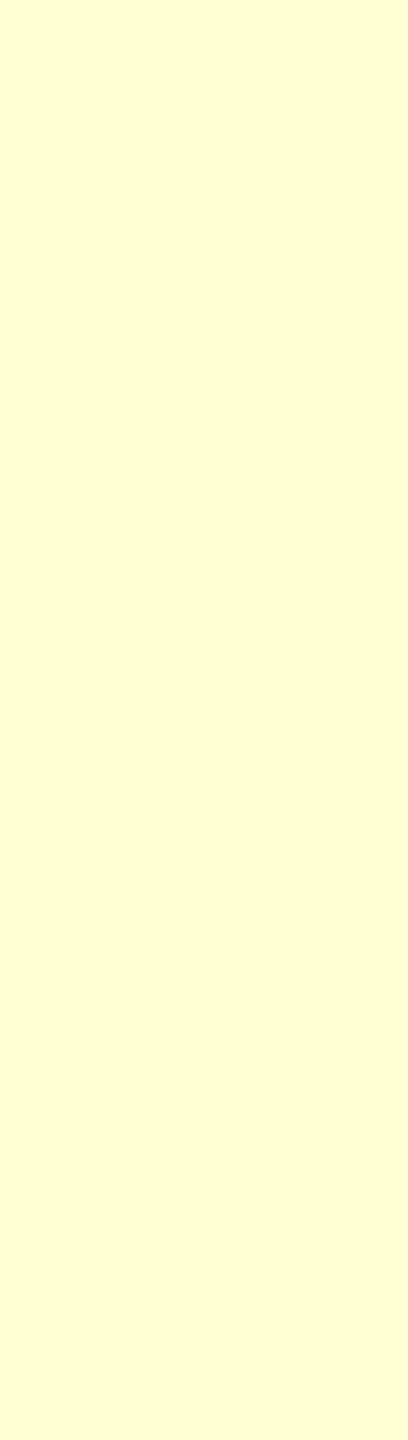
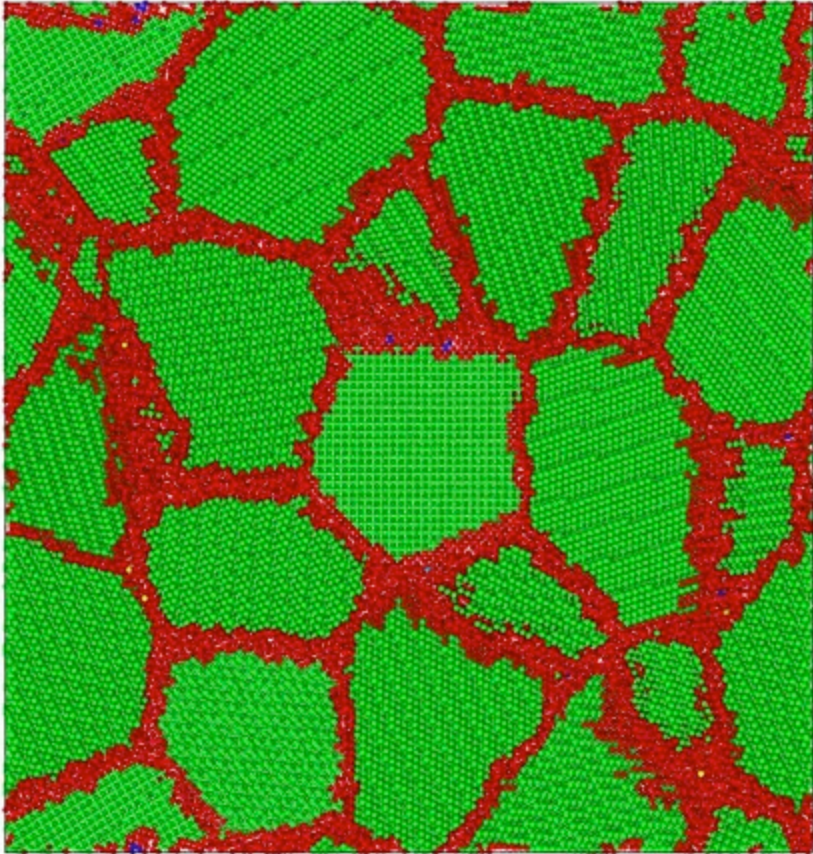




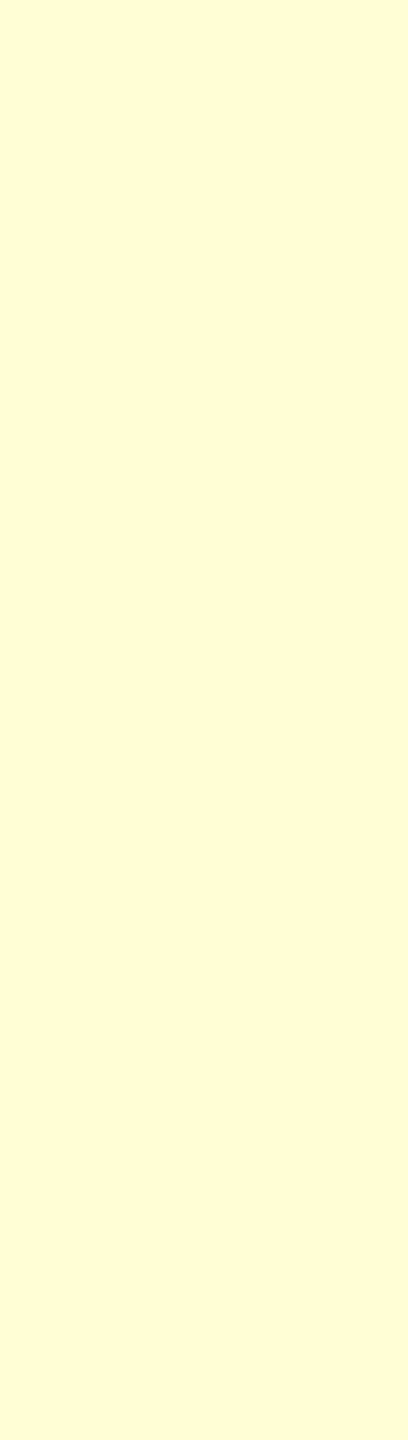
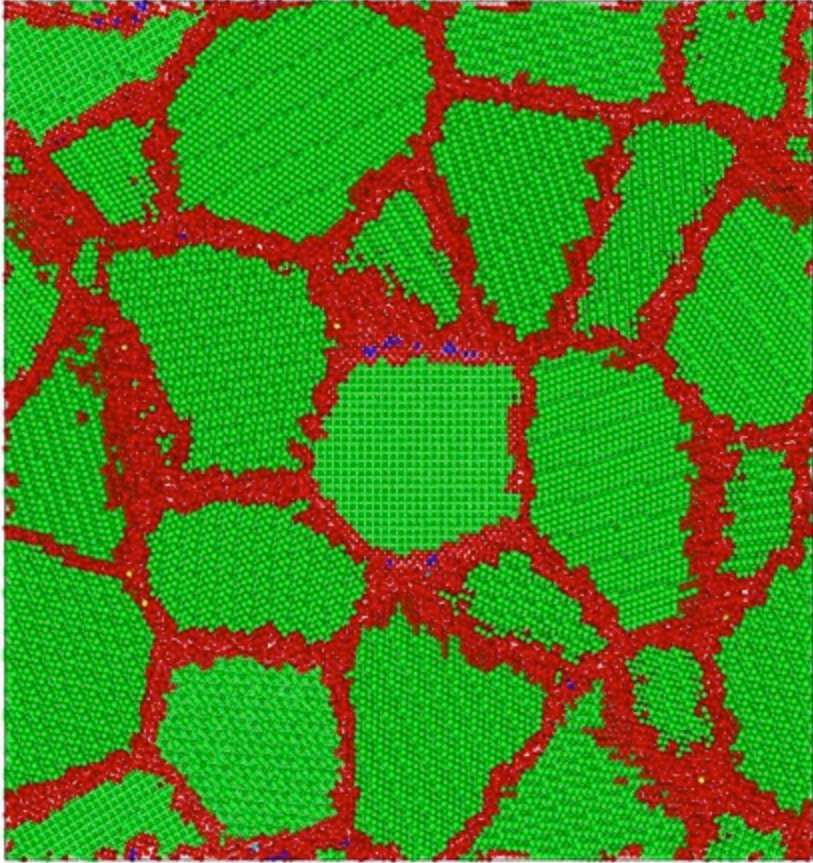


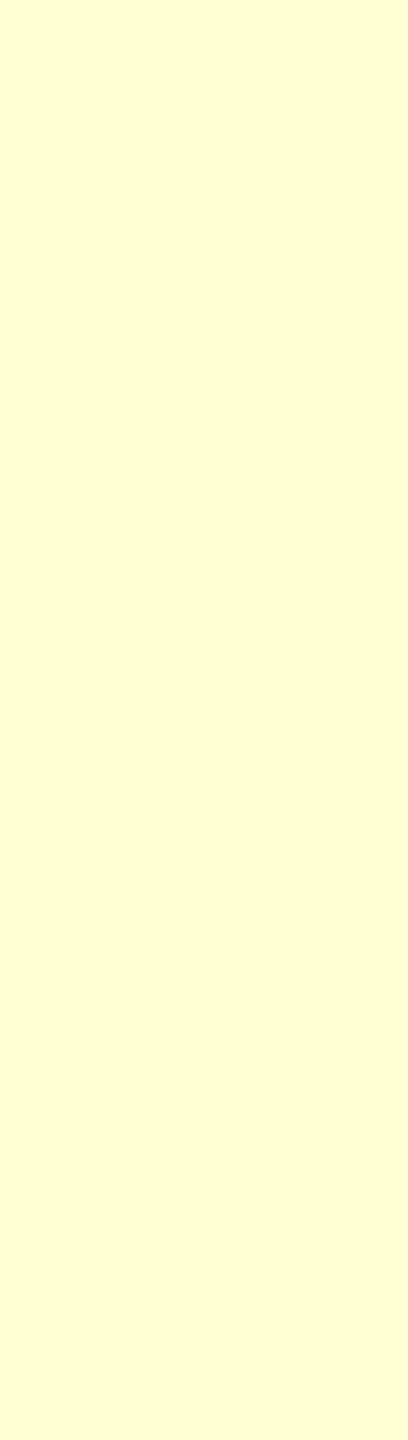
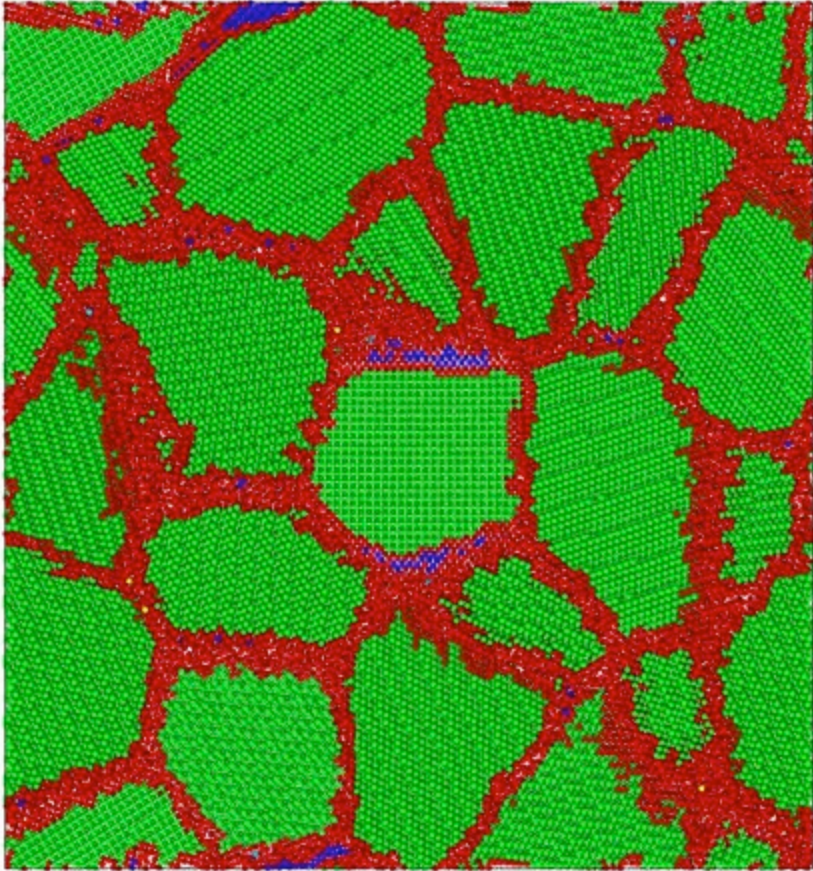




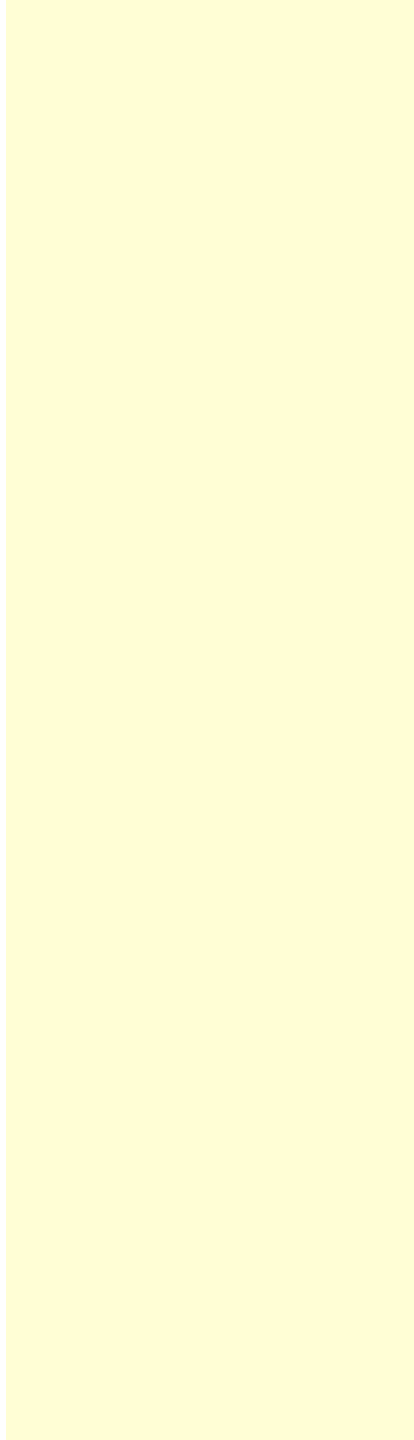
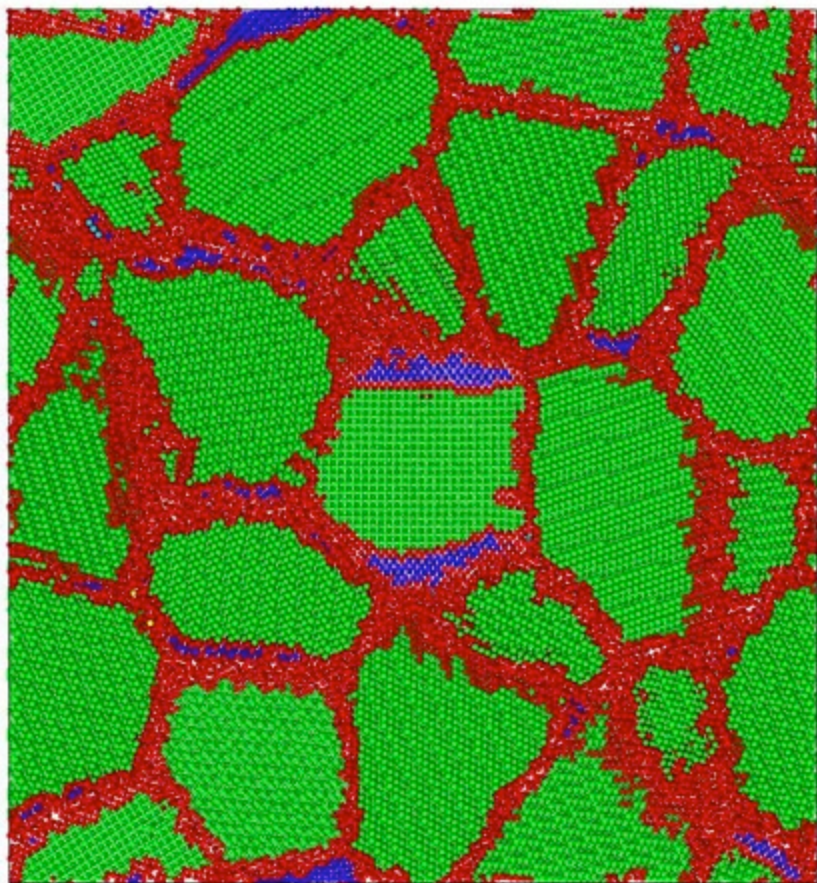


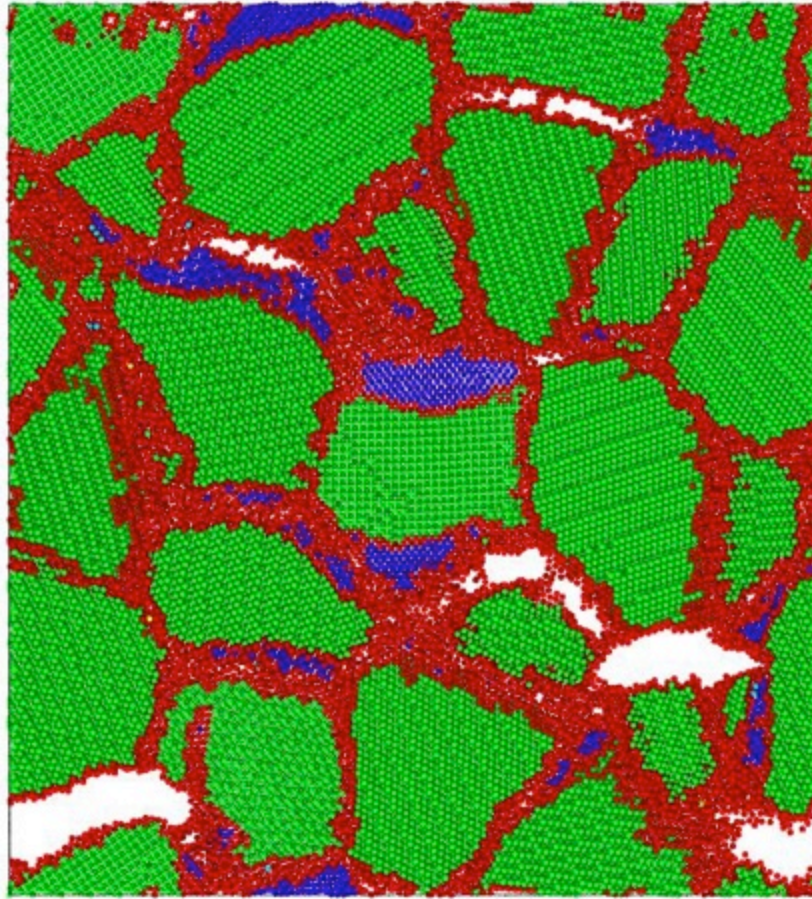




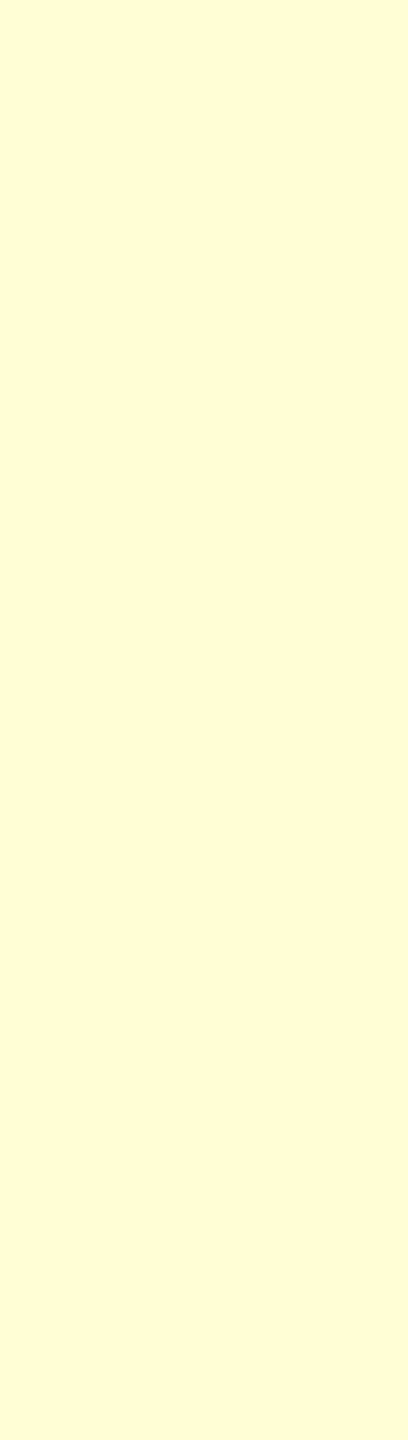
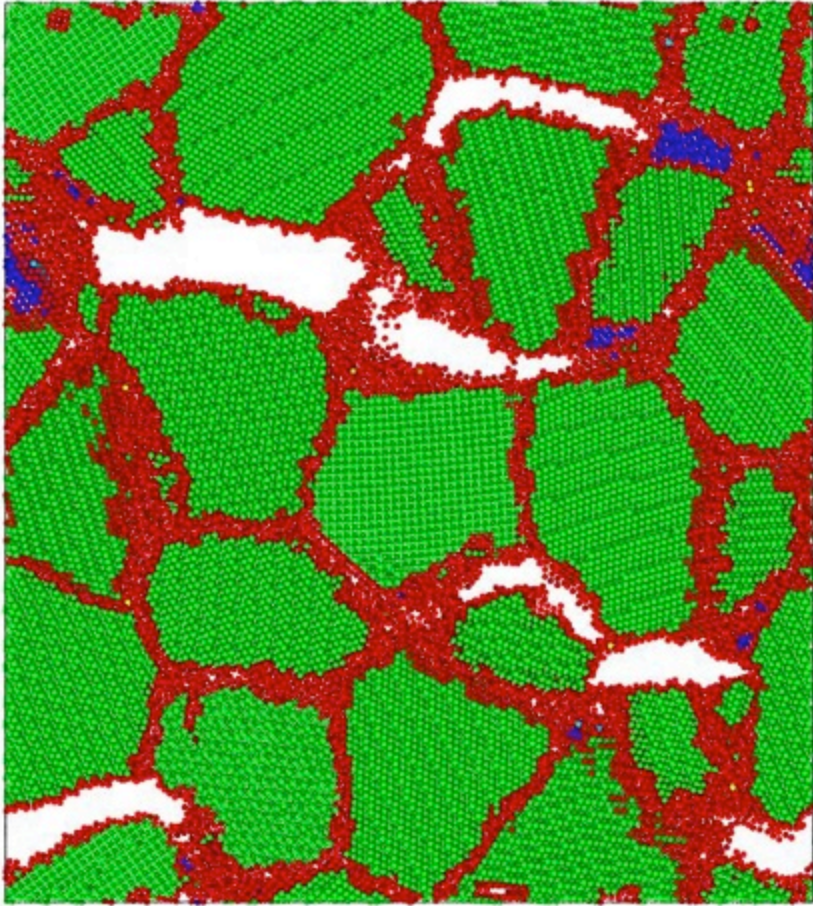


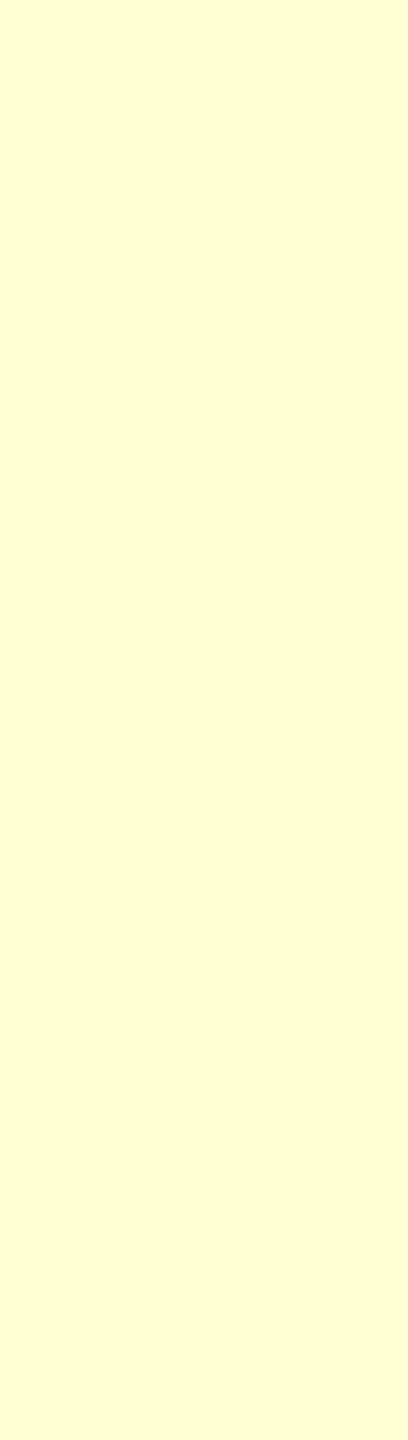
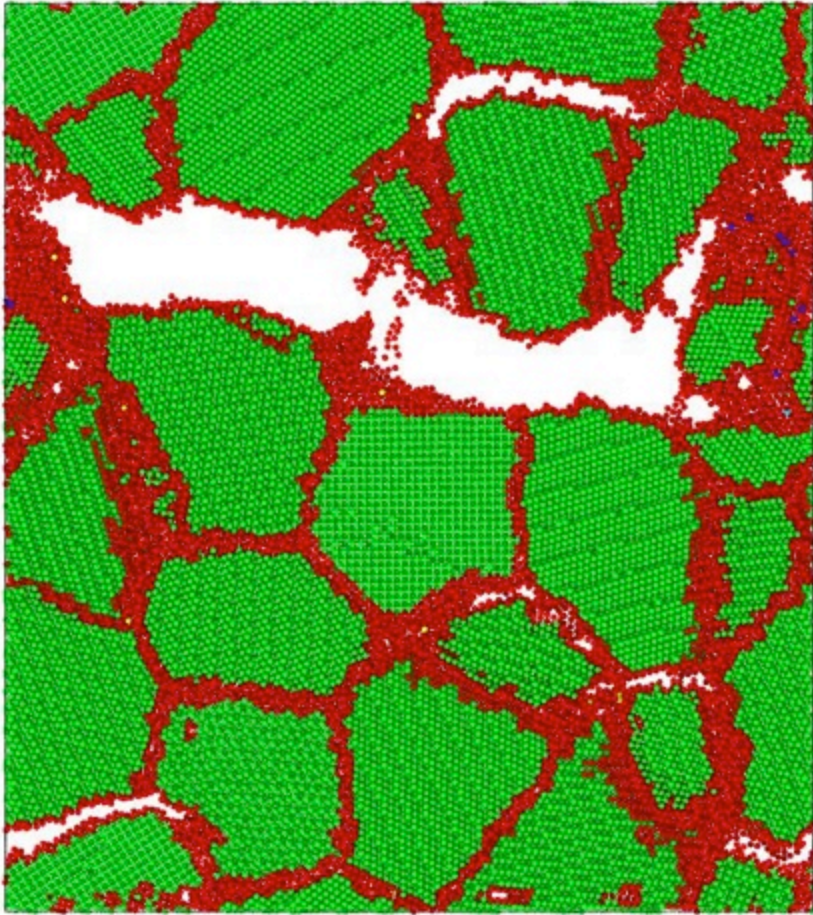




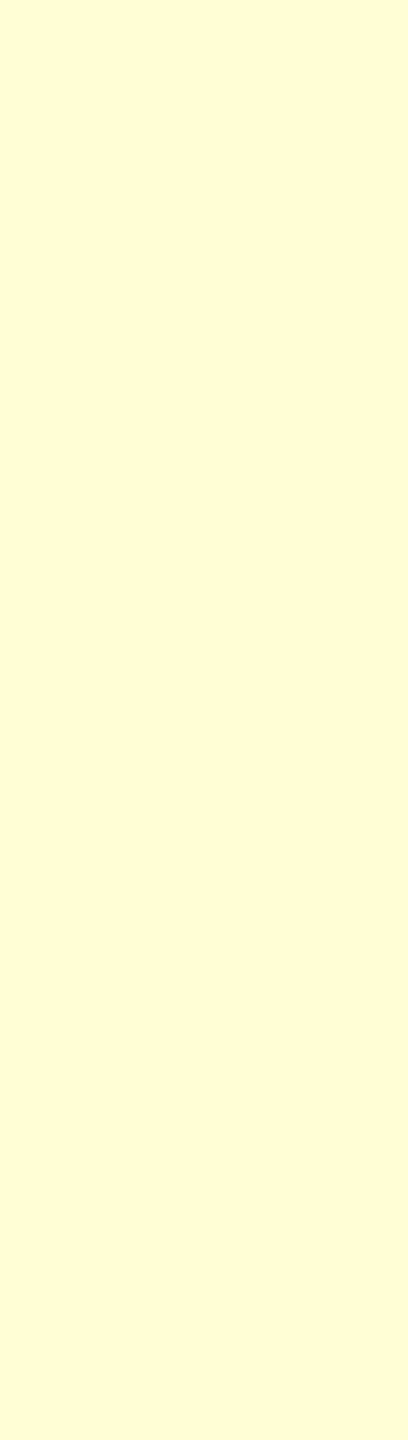
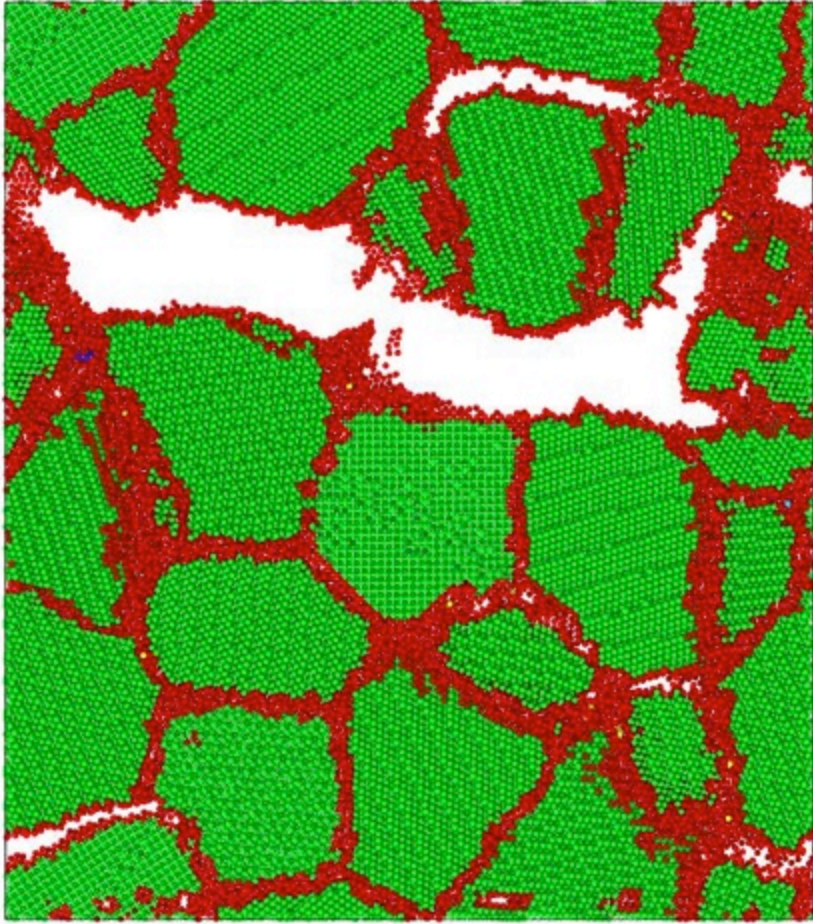


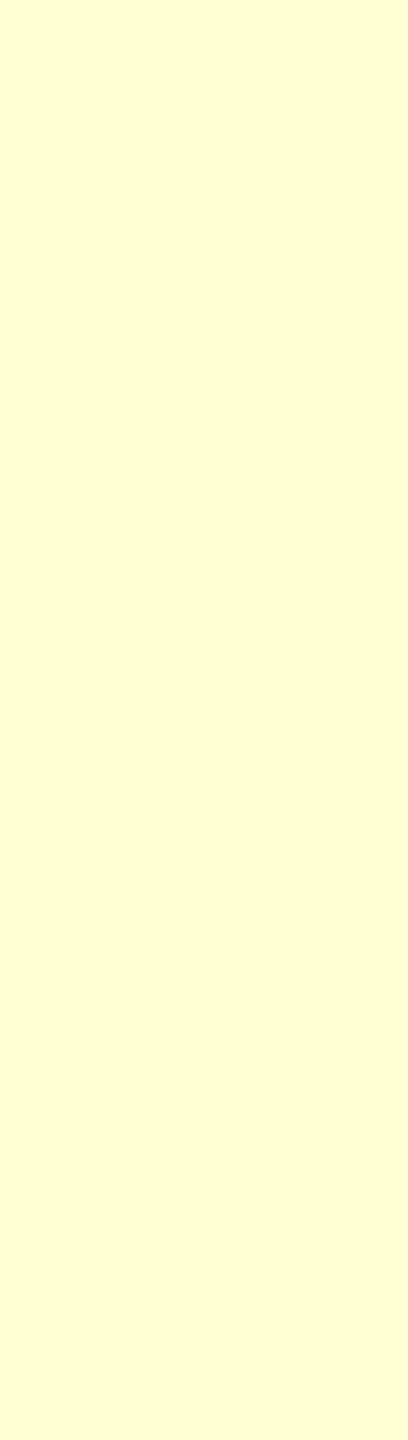
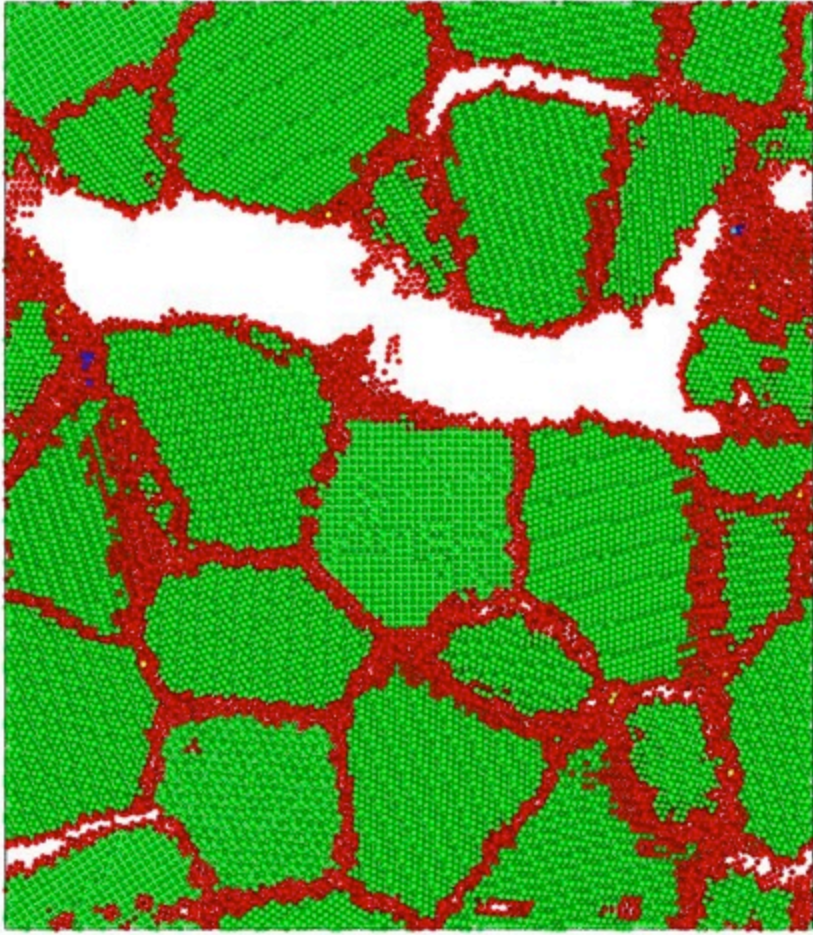




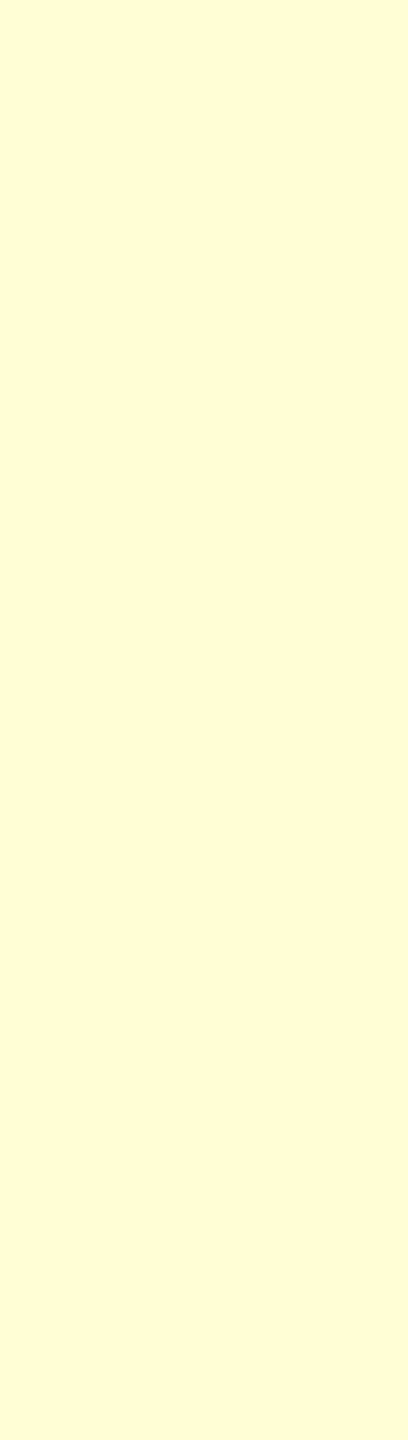
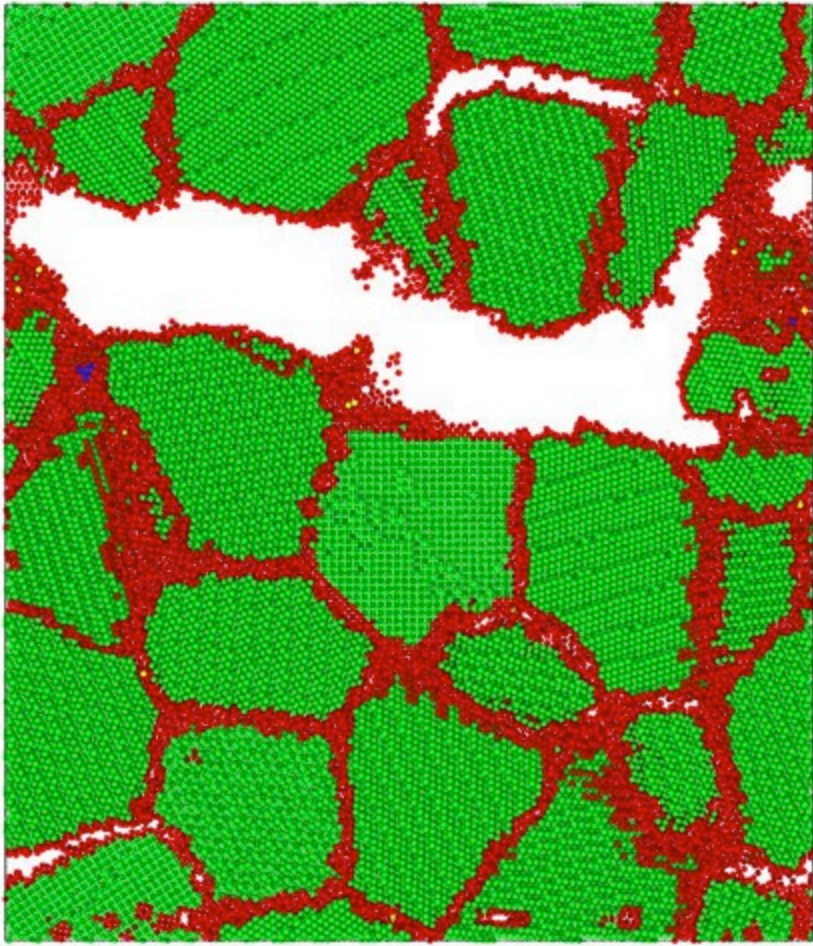


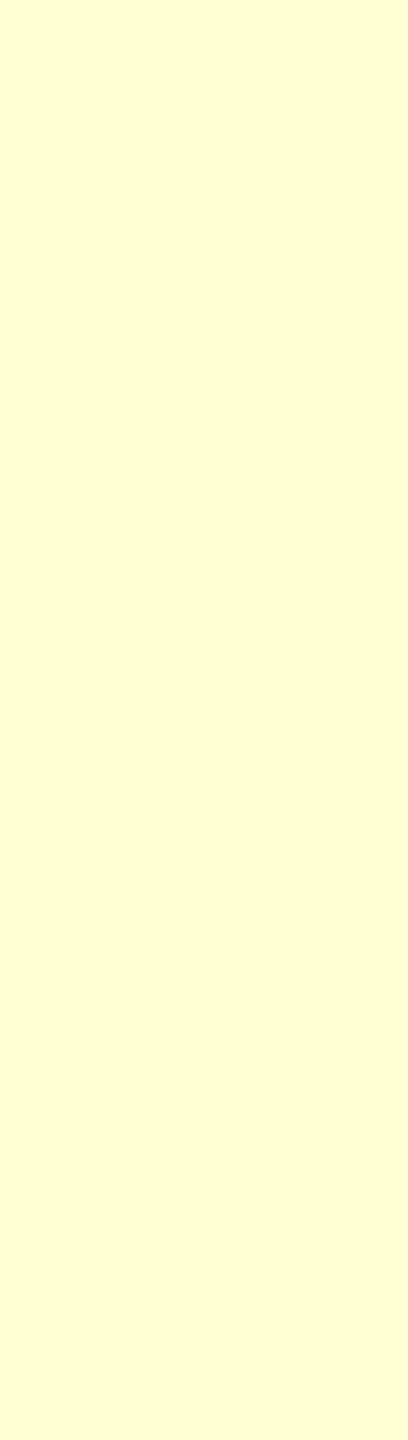
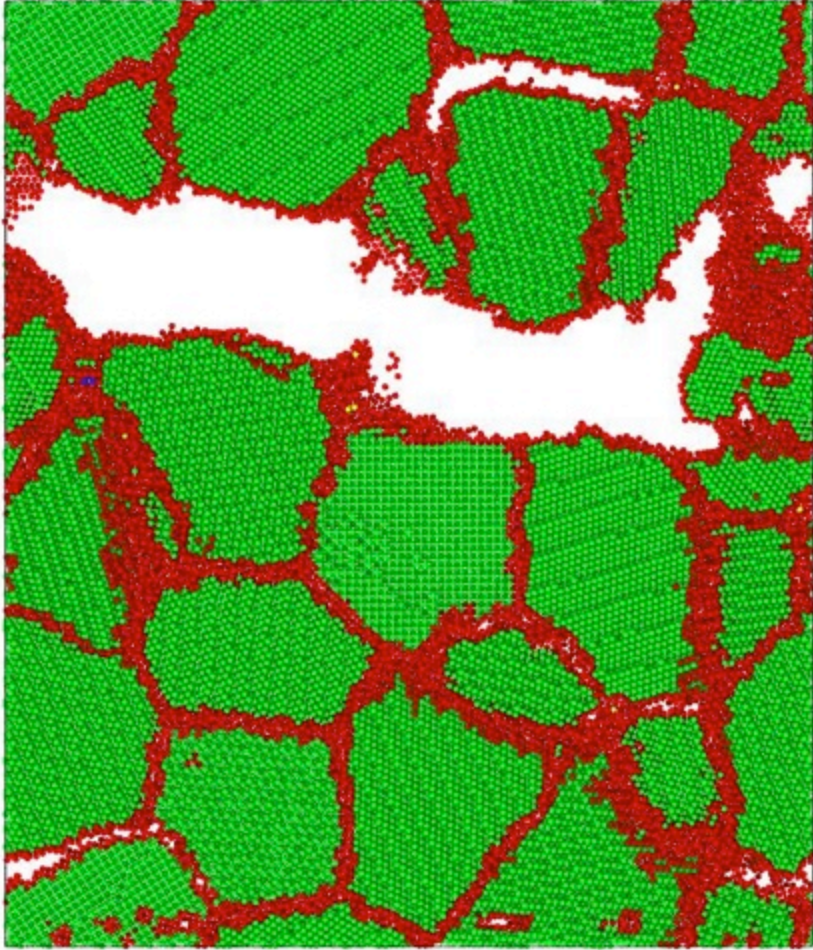




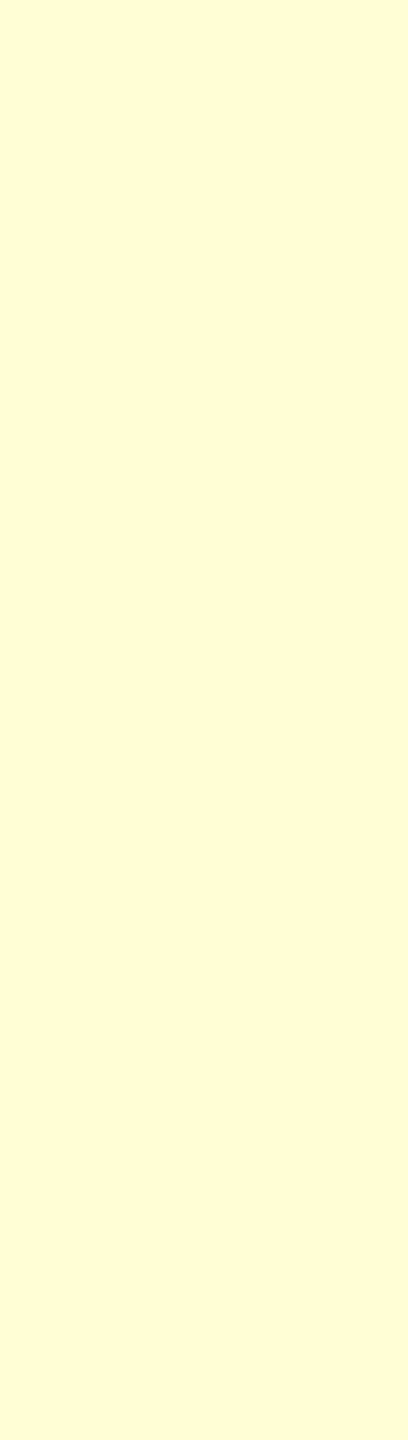
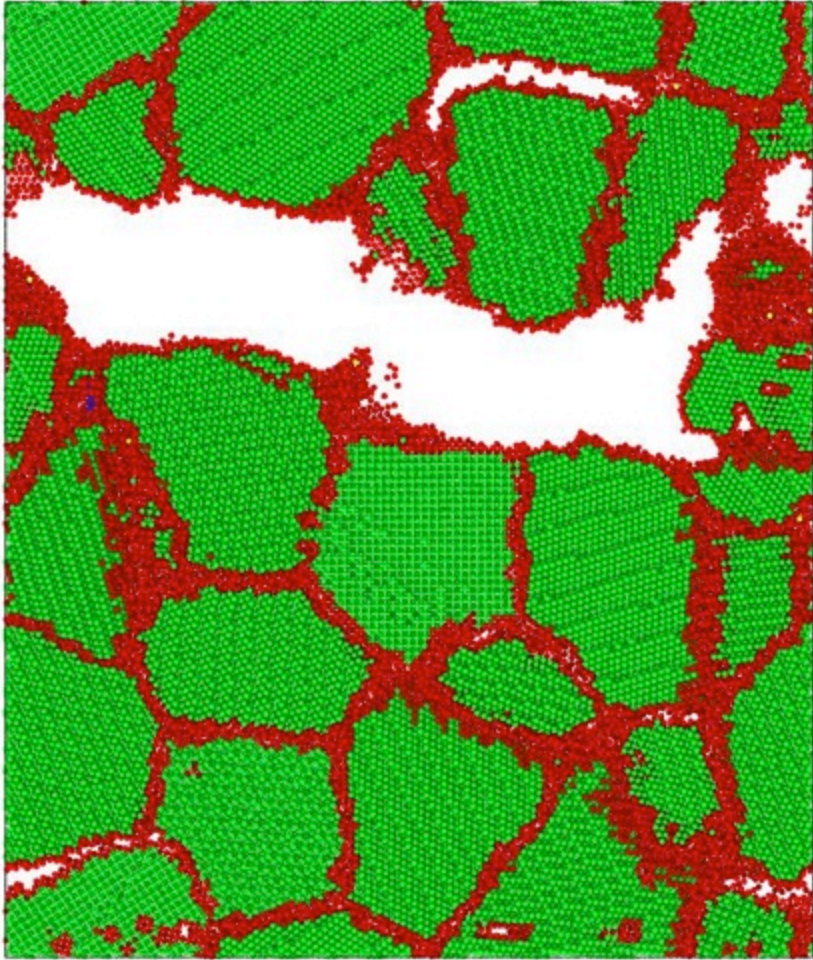


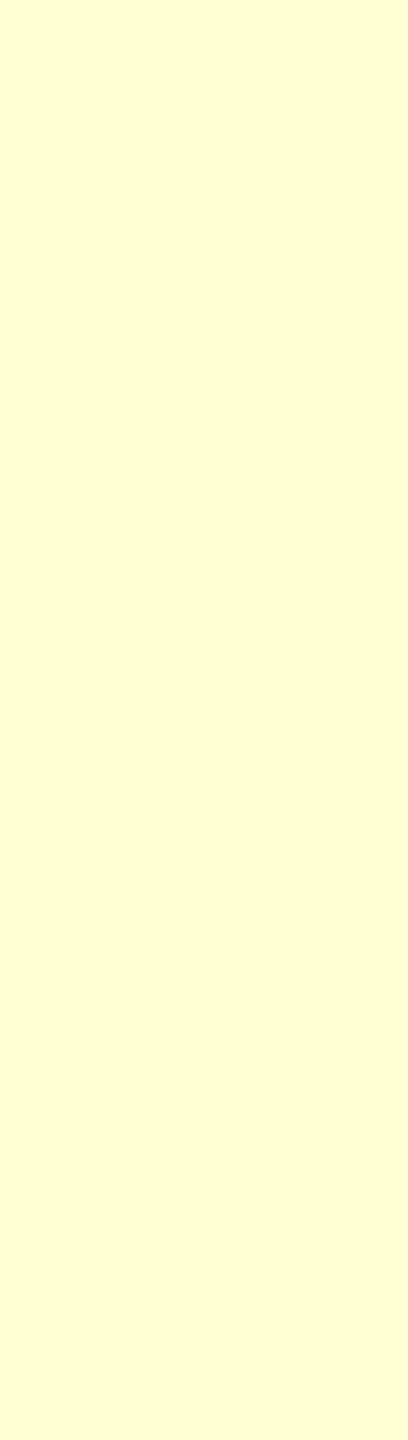
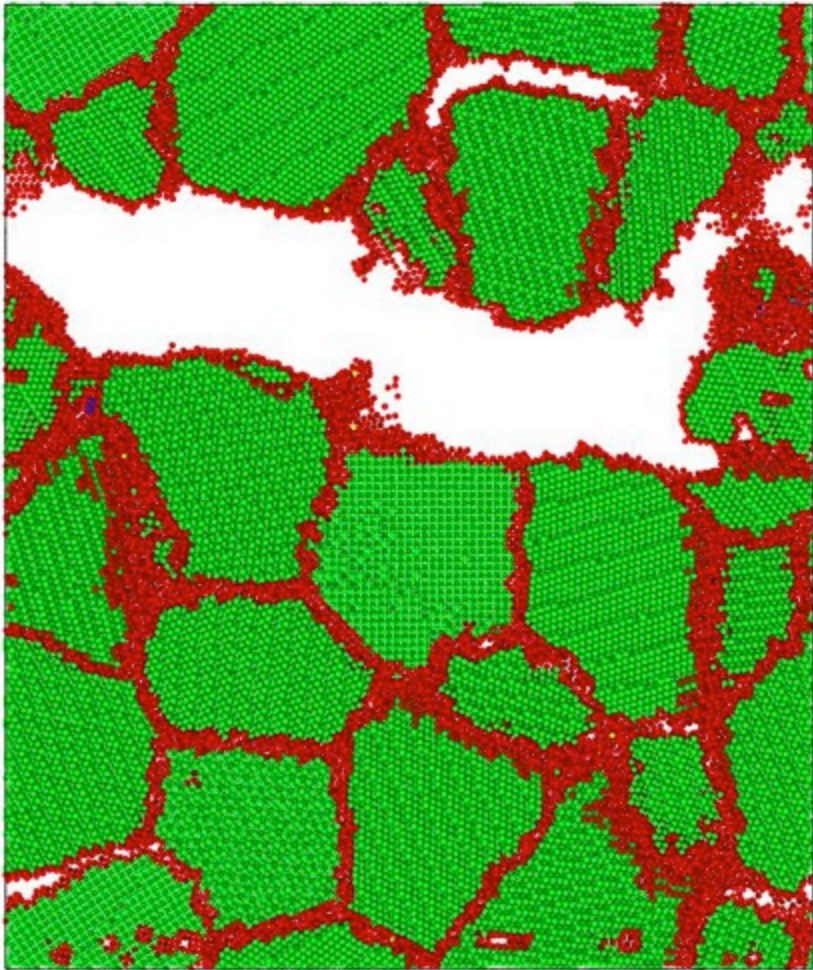




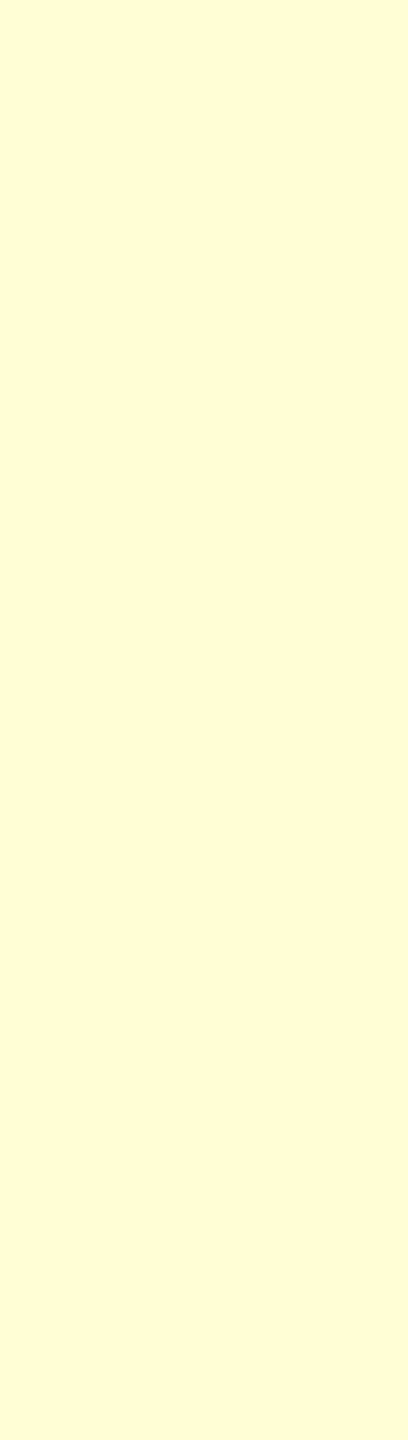
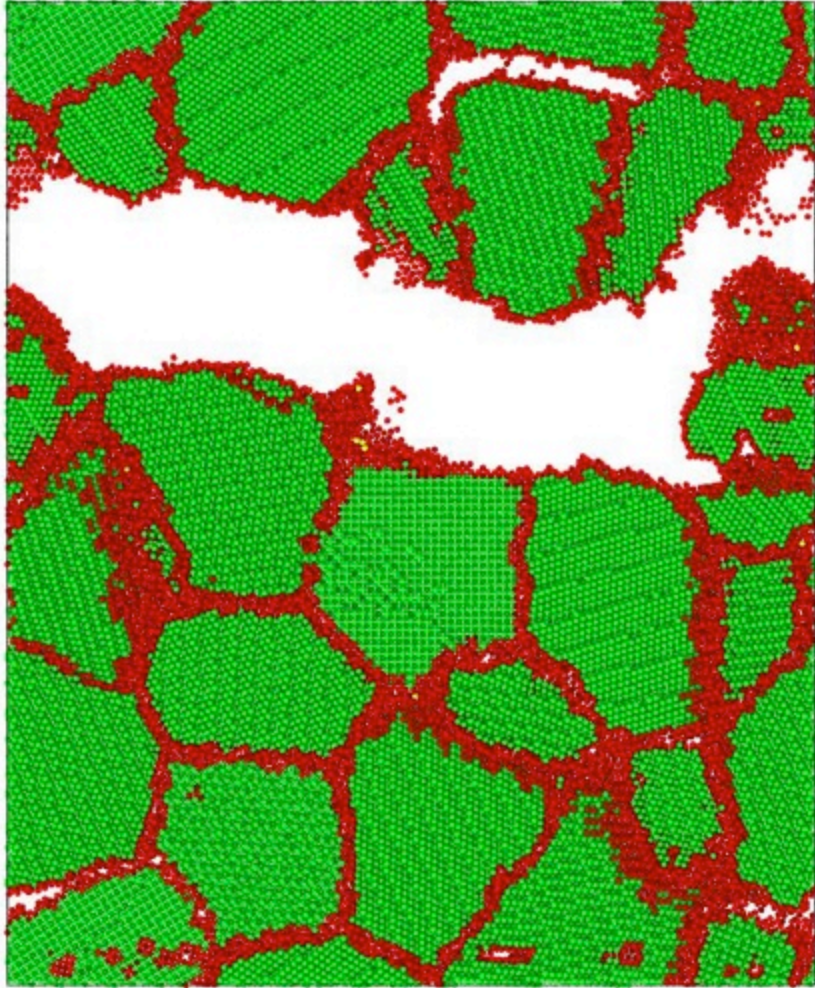


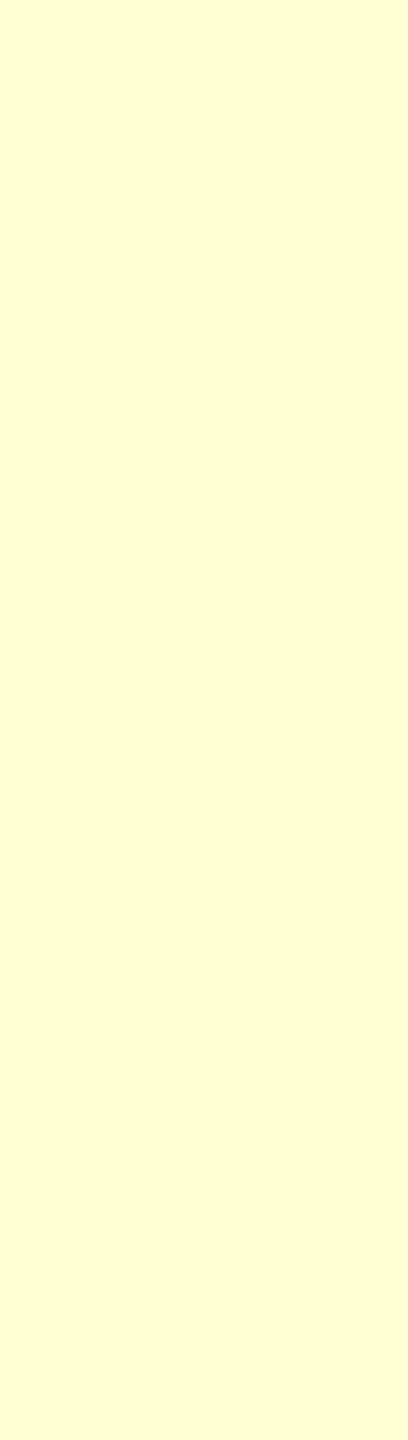
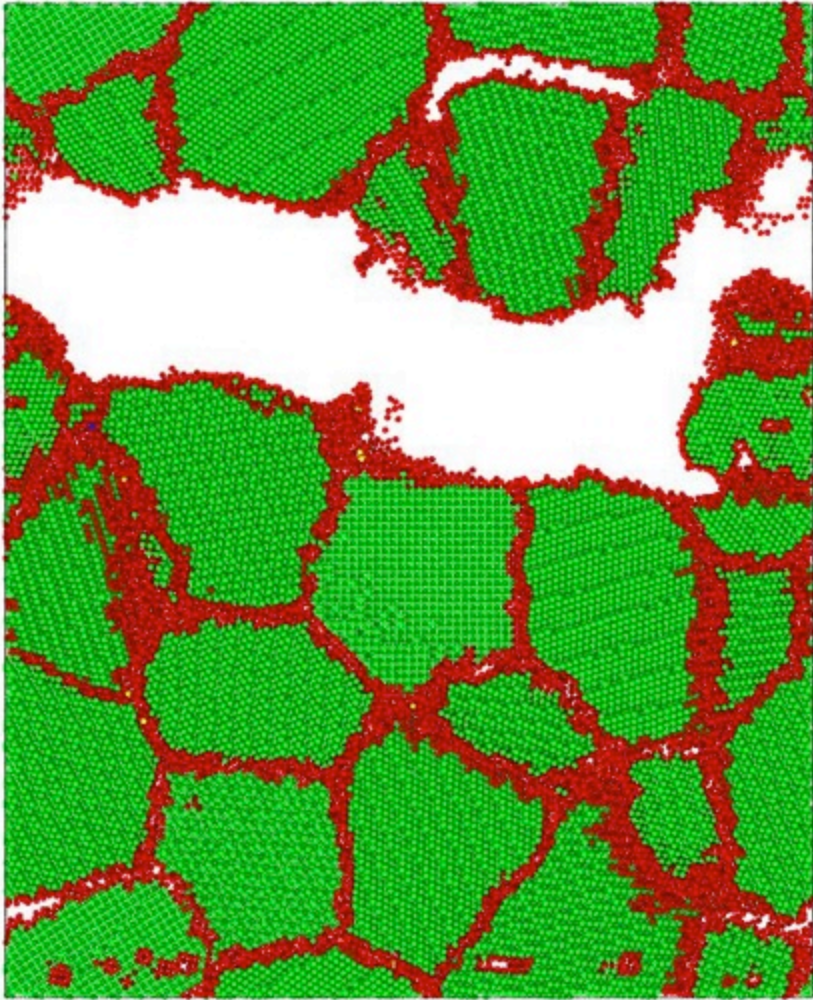




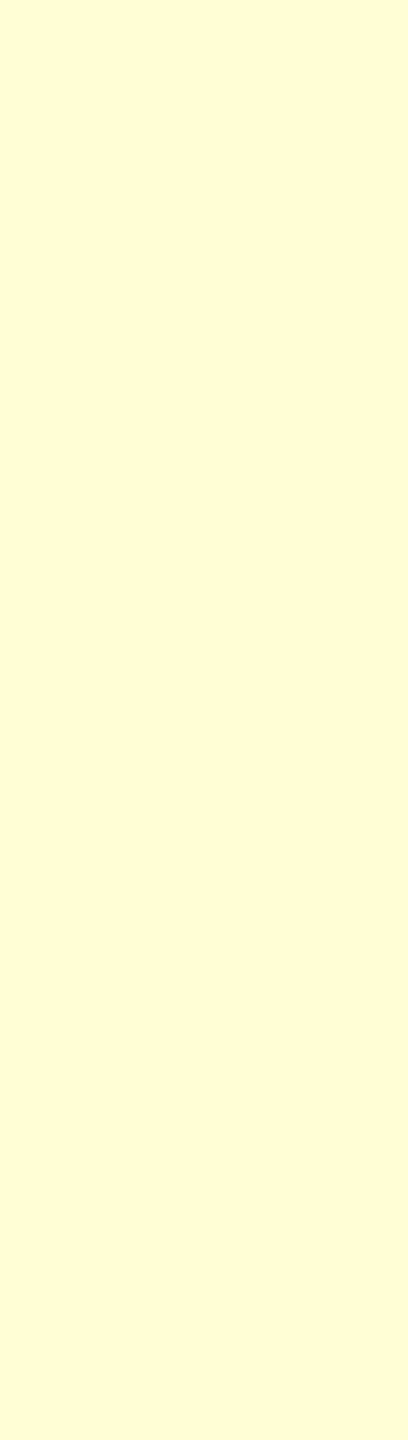
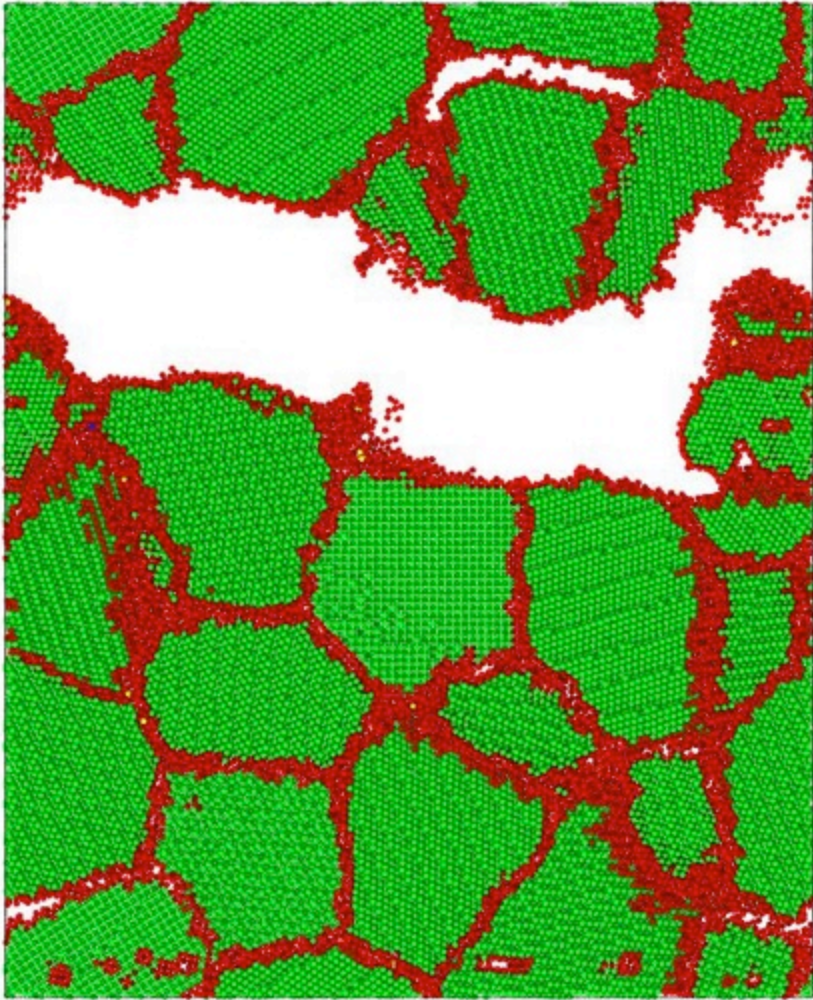


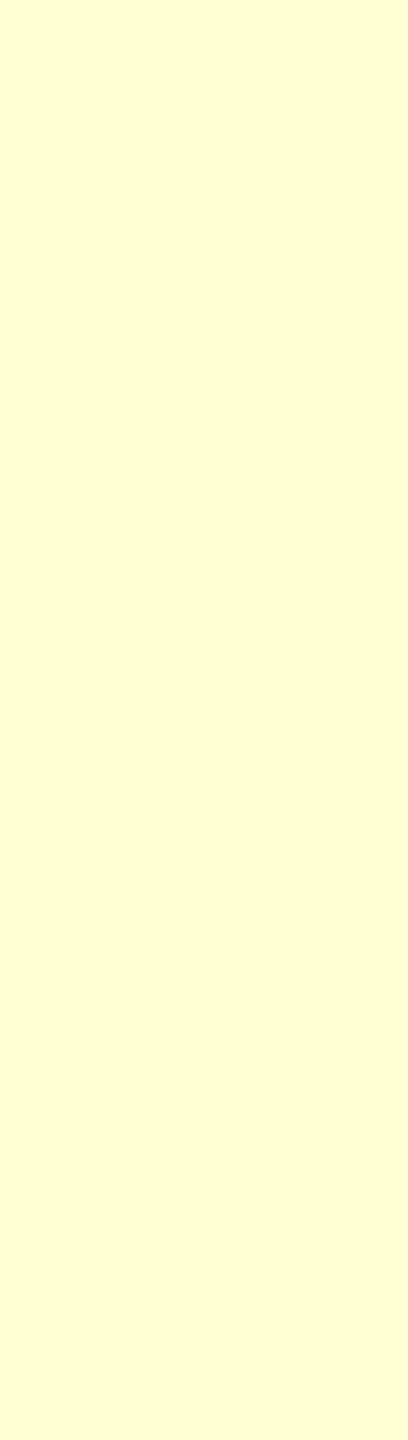
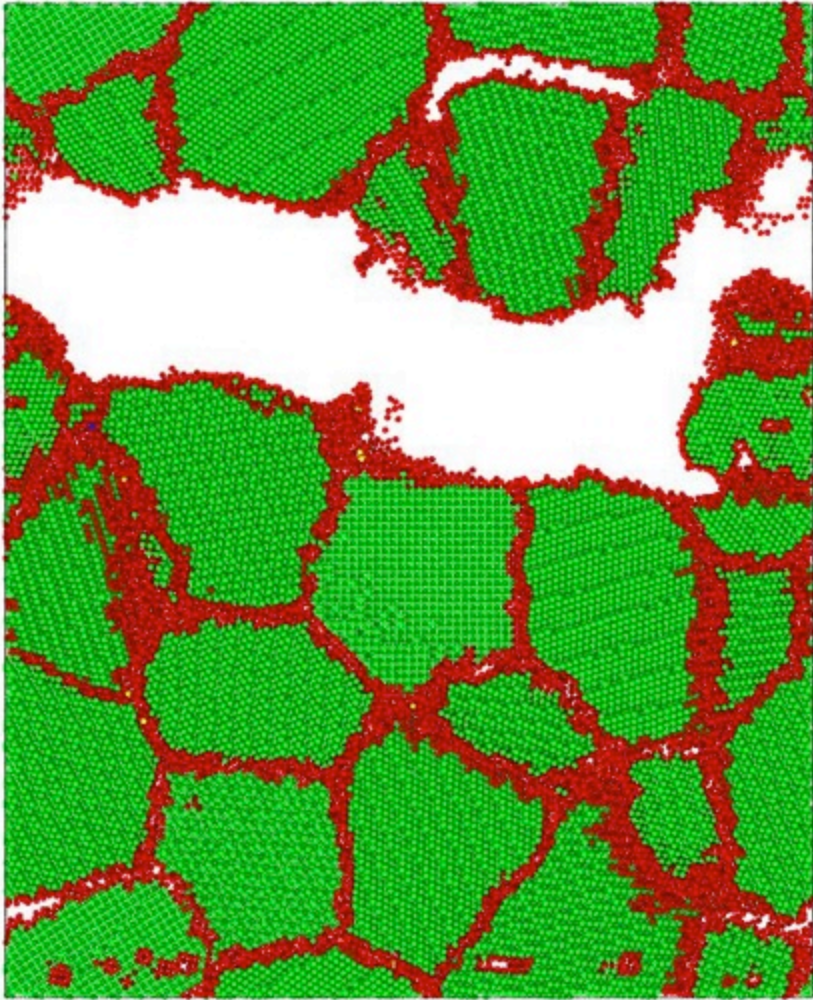






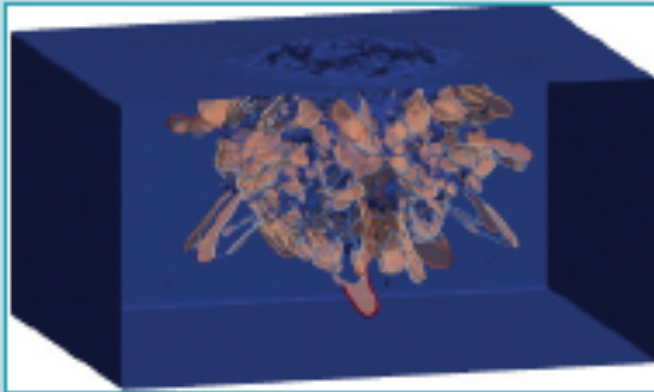






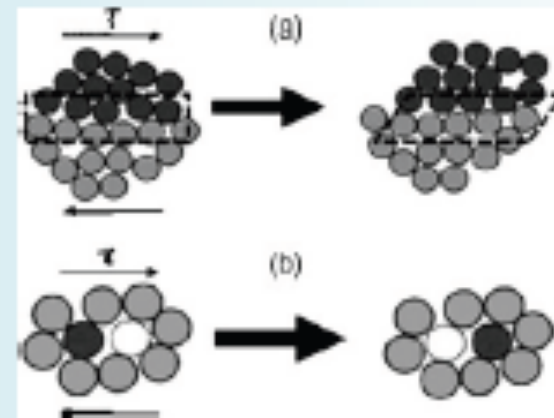
# Propiedades Mecánicas de Vidrios Metálicos

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



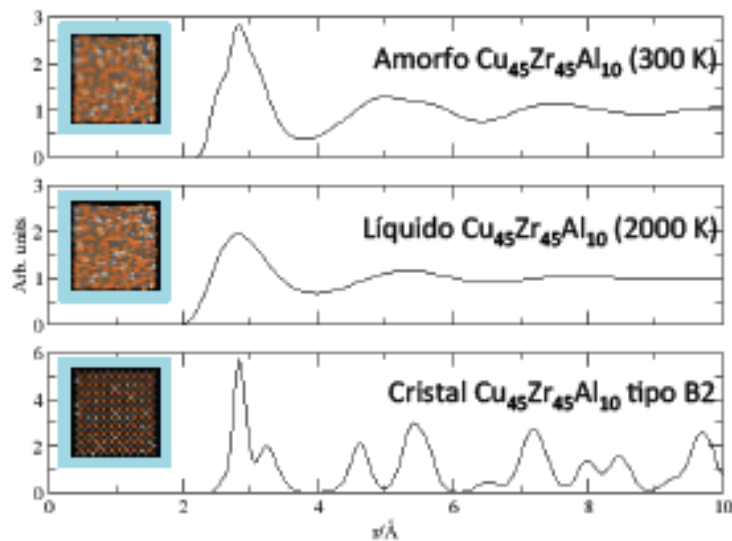
# Impacto entre proyectil y blanco de vidrio metálico

## Metodología

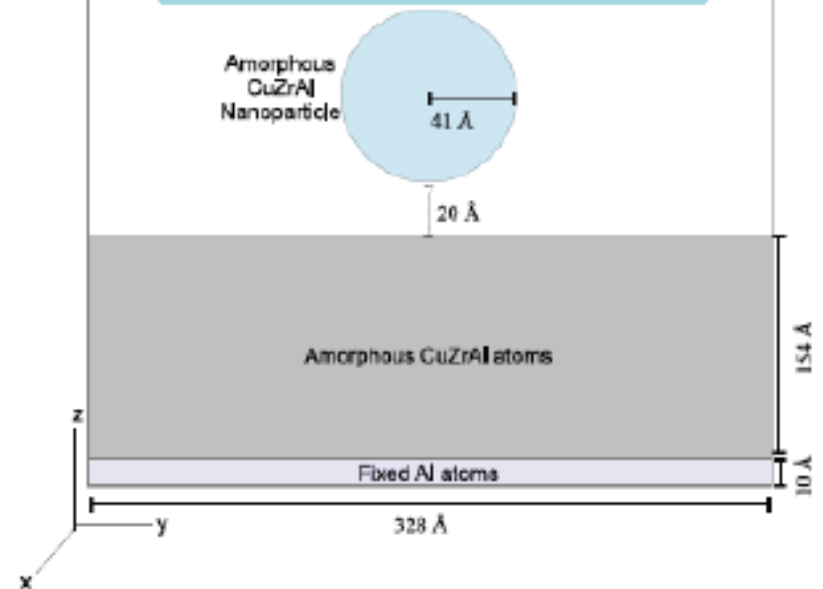
- 1.-Se generaron muestras de vidrio metálico de la aleación  $\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{45}\text{Al}_{10}$ , mediante calentamiento y enfriamiento rápido de un modelo de  $\text{CuZrAl}$  cristalino tipo B2.
- 2.-Analizamos las muestras con herramientas de diagnóstico como la función de distribución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

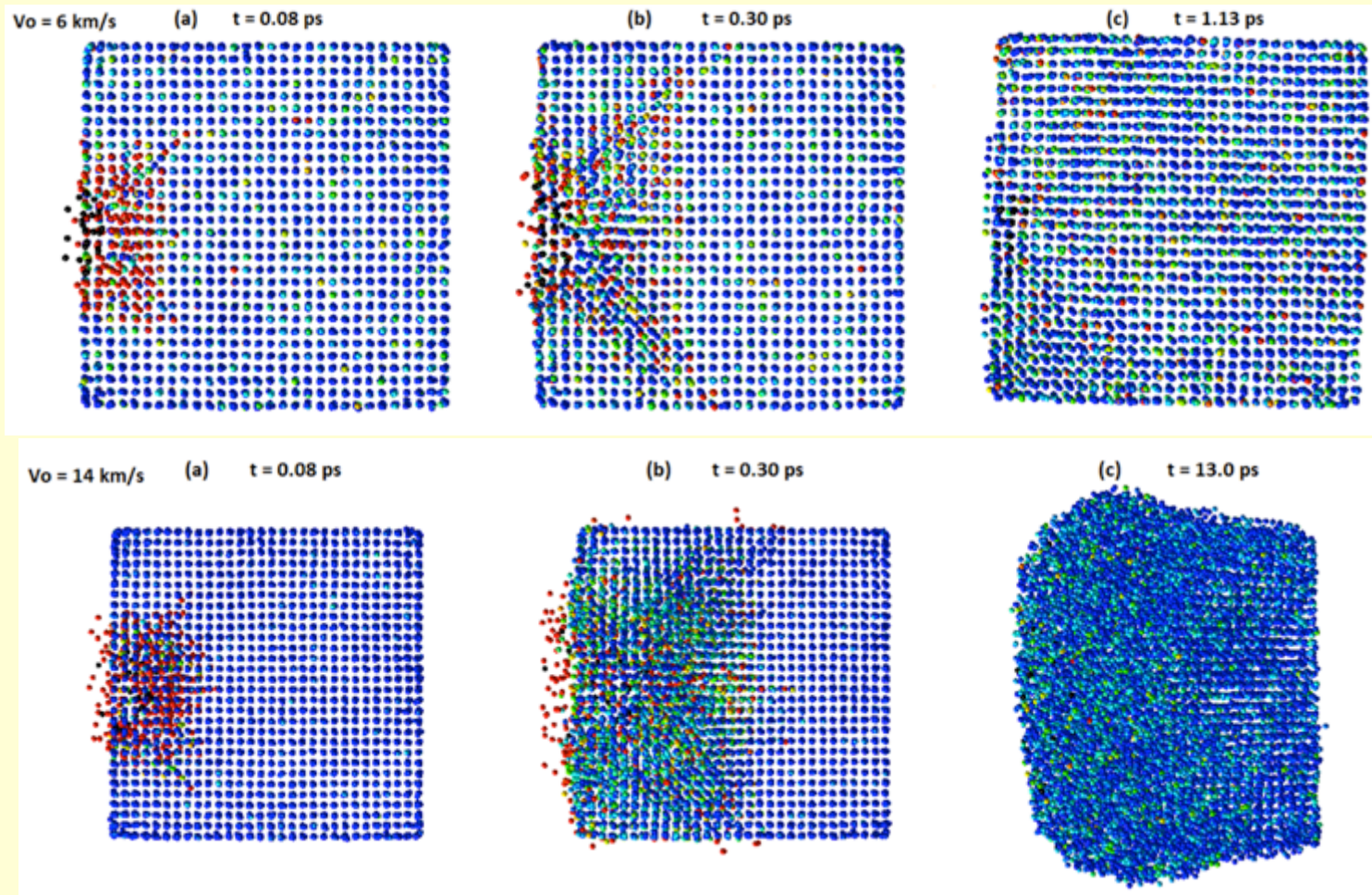


### Configuración inicial del impacto.

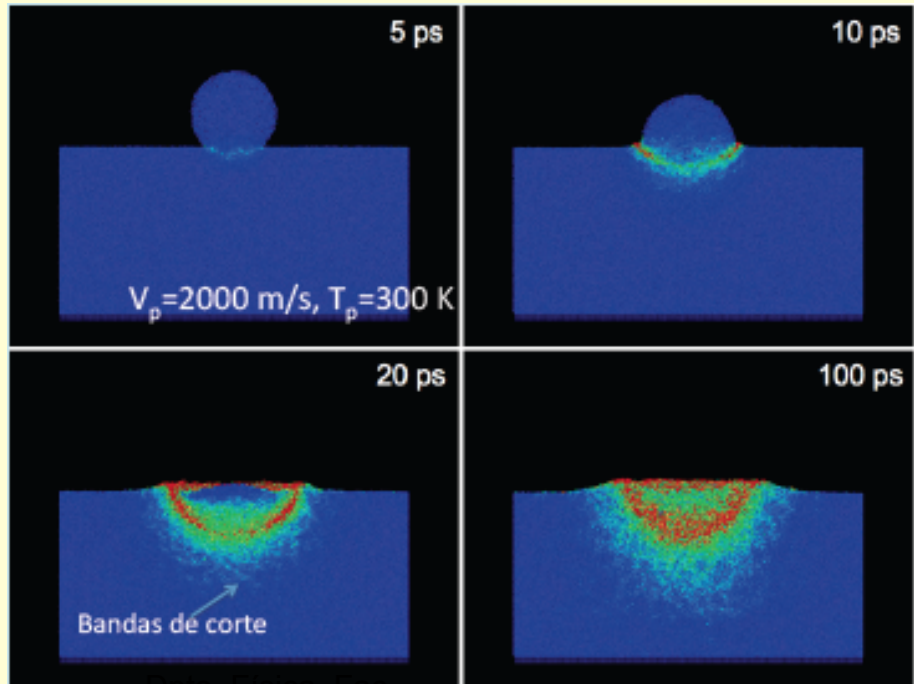
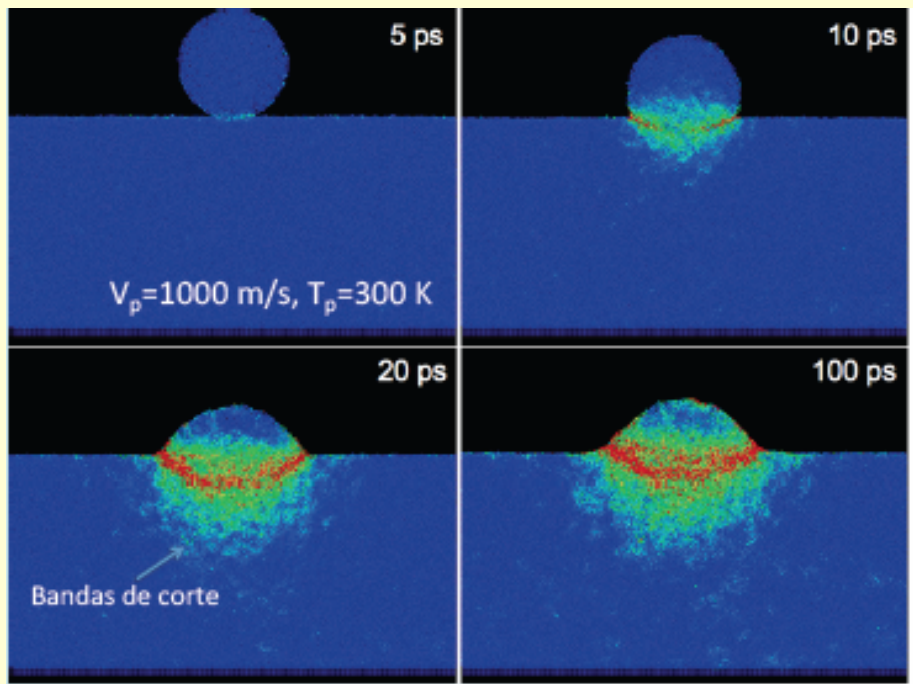
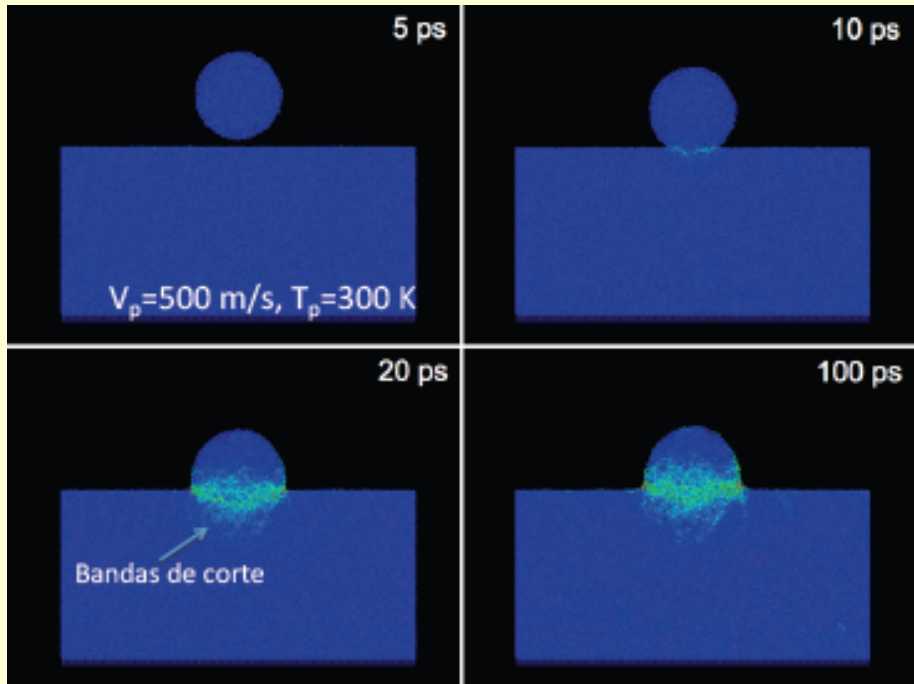


# ¿Qué ocurre en el impacto de proyectiles?

En 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).



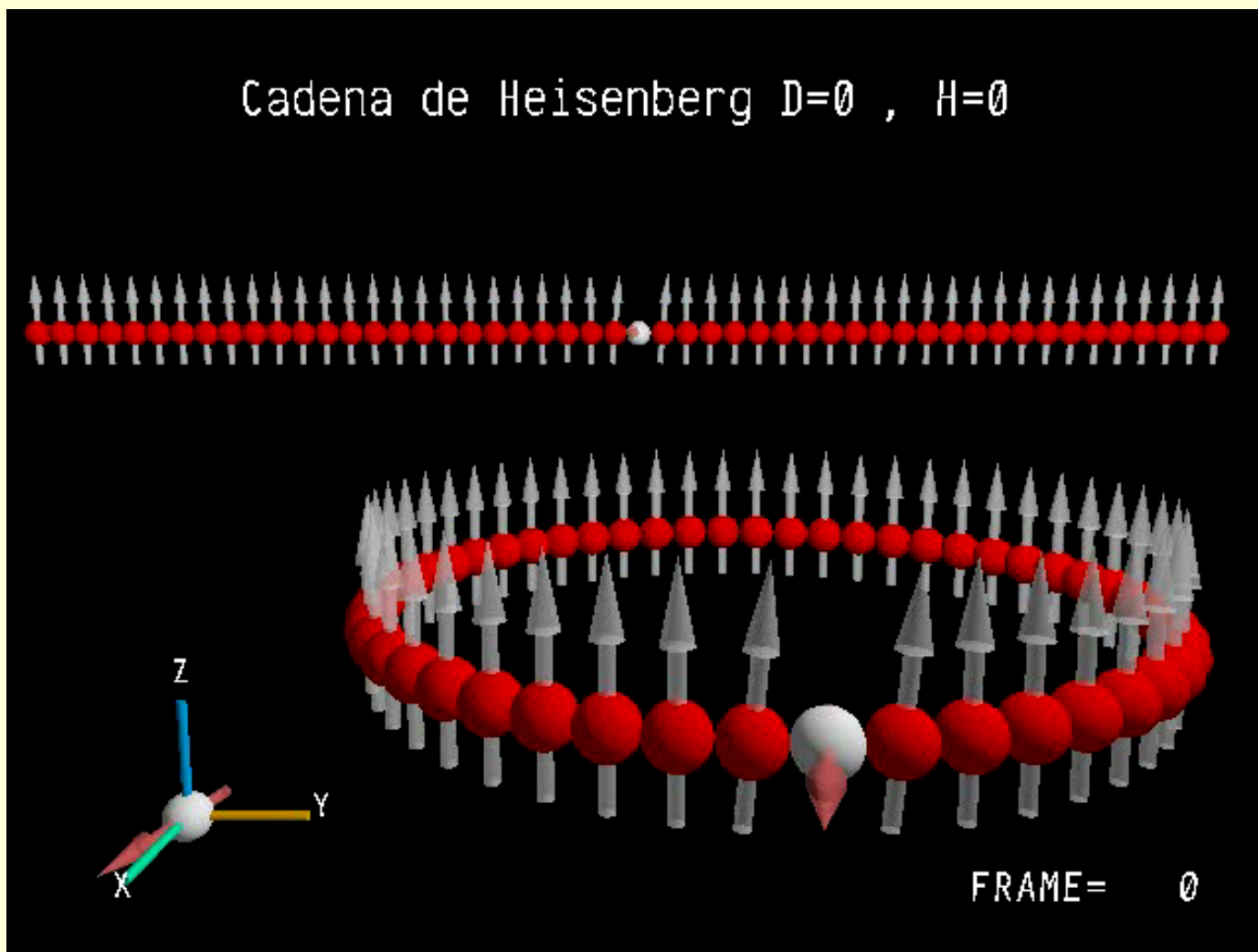
Tesis de doctorado en  
 Materiales, FCFM, U de Chile  
 Javier Wachter (2012).

# Animación

- **T 300 K**
- **2 millones átomos**



# Spintrónica: Dinámica de espines



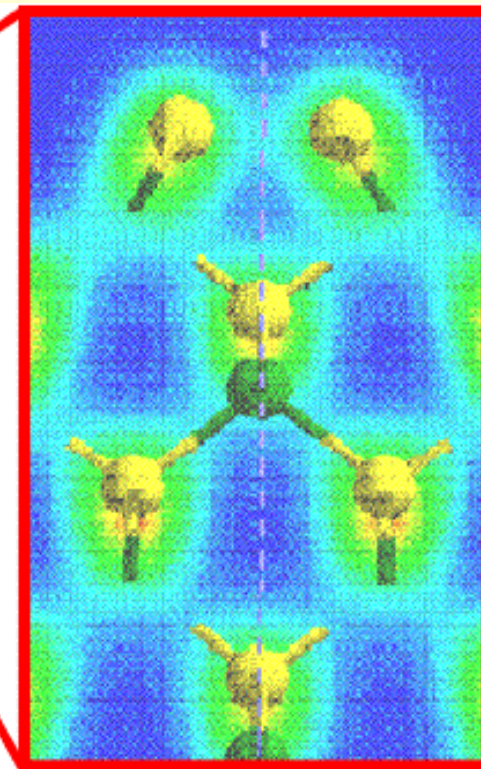
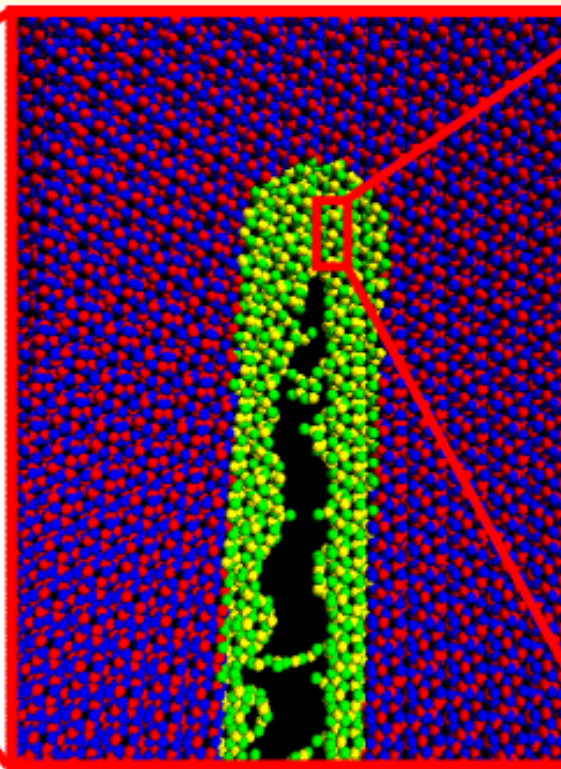
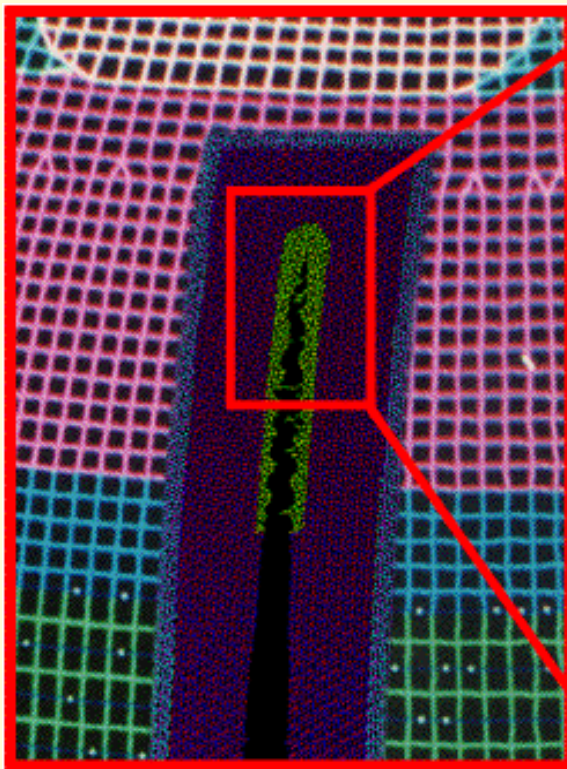


# Simulación multiescala

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)

# ¿Es posible diseñar materiales a la medida?

---

¡Sí!

aunque recién estamos en los comienzos de esta nueva revolución

¿Como andamos en casa?

# Física en Chile

Aproximadamente 200 físicos activos

Sólo unos 20 trabajando en nanomateriales

Carreras:

Pregrado:

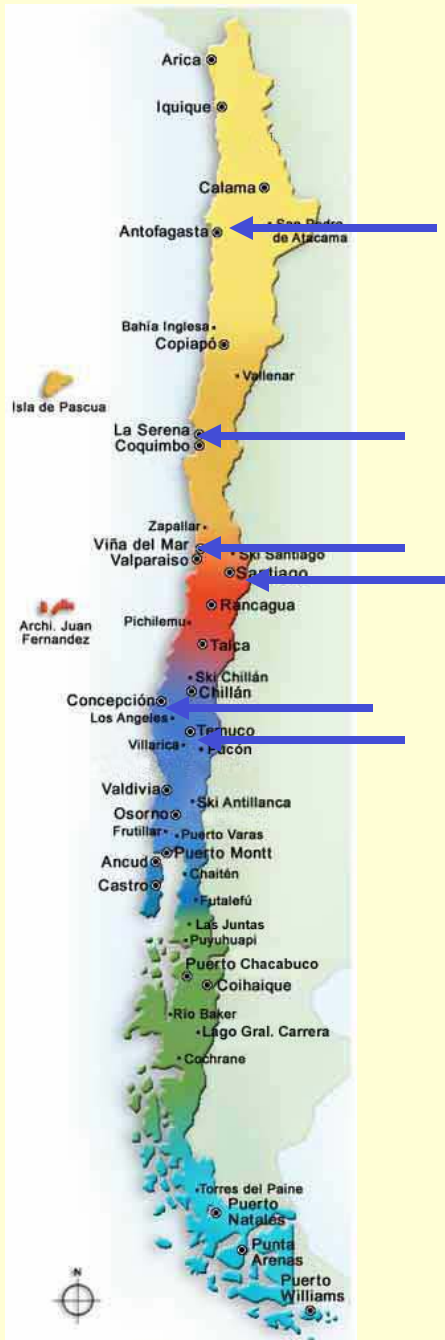
Licenciatura en Física: 4 años

Ingeniería Física: 5 años

Postgrado:

Magister en Física: 2 años

Doctorado en Física: 4 años



# Simulación de NanoMateriales

---

- **Eduardo Menéndez:** Semiconductores, puntos cuánticos. Cálculos ab-initio: estructura electrónica, fonones, constantes elásticas.
- **Walter Orellana:** Cálculos ab-initio, semiconductores, superficies. Nanotubos de carbono.

## Estudiantes de doctorado

- Joaquín Peralta
- Claudia Loyola
- Eduardo Valdebenito
- Paula Escobar

## Magister

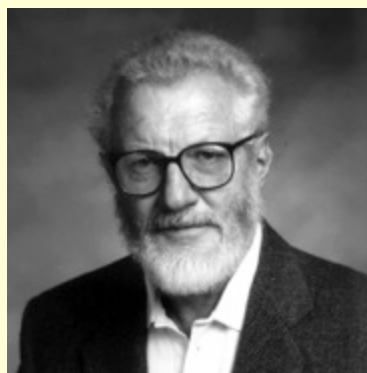
Fernando Cuturrufo

# Nobel de Física 2000



**Jack S. Kilby**

*"for his part in the invention of the integrated circuit"*

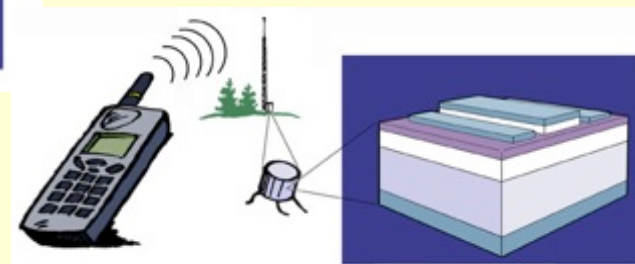
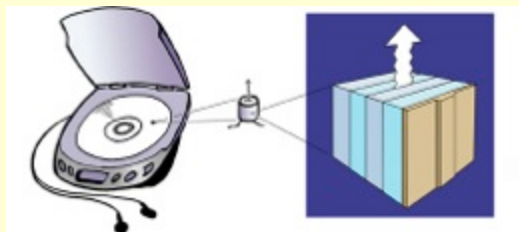


**Herbert Kroemer**

*"for developing semiconductor heterostructures used in high-speed- and opto-electronics"*



**Zhores I. Alferov**



**Gracias por su  
atención**