



**UNCUYO**  
UNIVERSIDAD  
NACIONAL DE CUYO



**FACULTAD  
DE INGENIERÍA**

# **“NANOMATERIALES: CARACTERIZACIÓN Y MODIFICACIÓN DE PROPIEDADES MECÁNICAS”**

## **MATERIALES**

**Prof. Titular: Dra. Ing. María J. Santillán**

**Prof. Adjunto: Dr. Ing. Claudio Careglio**

# ***PLAN DE LA PRESENTACIÓN***

---

- Introducción
- Caracterización de un BMG
- Propiedades mecánicas de un BMG con nanopartículas embebidas
- Propiedades mecánicas de un BMG poroso sinterizado (nanovidrio)

# Introducción

---

## VIDRIOS METÁLICOS (METAL AMORFO)

- **Metal tradicional:**

La estructura es de tipo cristalina, es decir existe orden o regularidad para las posiciones atómicas

- **Metal amorfo:**

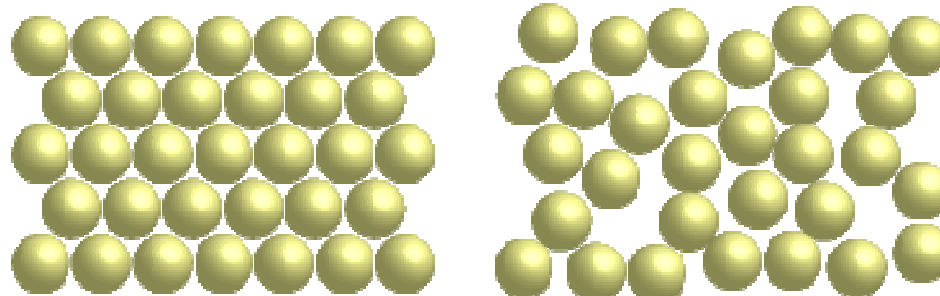
Las posiciones atómicas son desordenadas.

Aleación metálica: Cu, Ni, Fe, Au, Zr, Be, La, Pd, Ti

Aunque también puede contener no metales en baja concentración.

Obtenido con un control cuidadoso de la composición de la aleación y empleando altas velocidades de enfriamiento.

Bulk Metallic Glasses (vidrios metálicos volumétricos): aumento en el espesor.



# Introducción

---

## PROPIEDADES

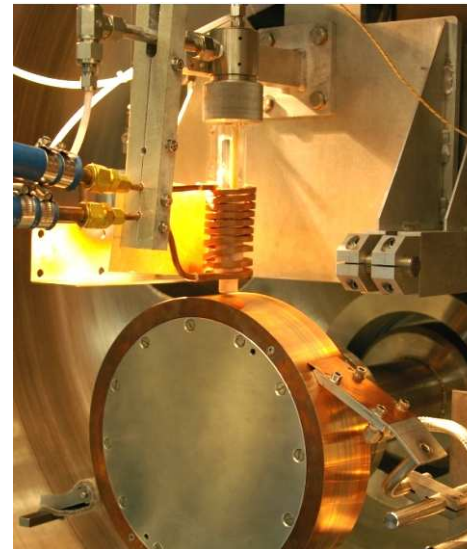
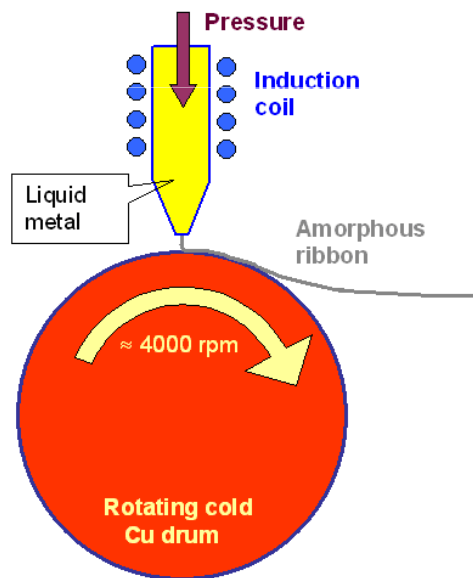
- **Ventajas:**
  - Alta dureza
  - Resistencia al desgaste y la abrasión
  - Gran resistencia mecánica
  - Alta resiliencia
  - Combinan la alta moldeabilidad de los polímeros con la resistencia de aceros de alta resistencia.
  - La ausencia de bordes de granos le otorga una gran resistencia a la corrosión.
- **Desventajas:**
  - Costosos.
  - Limitaciones de fabricación.
  - Disminución de la ductilidad por la aparición de bandas de corte.
- **Modificación de propiedades:**
  - Modificación de la aleación.
  - Radiación.
  - Partículas cristalinas.
  - Nanoporos

# Introducción

---

## FABRICACIÓN

- Un líquido podría convertirse en vidrio a velocidades de enfriamiento suficientemente altas y temperaturas suficientemente bajas evitando el proceso de cristalización (Turnbull et al, 1961)
- Obtención de vidrios metálicos por “melt spinning”:



Turnbull, D. and Cohen, M., J. Chem. Phys., 34(1), 120-125 (1961)

Institute for Material Science, Faculty of Engineering, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Germany.

Fraunhofer Institute for Manufacturing Technology and Advanced Materials, in Dresden, Germany.

# Introducción

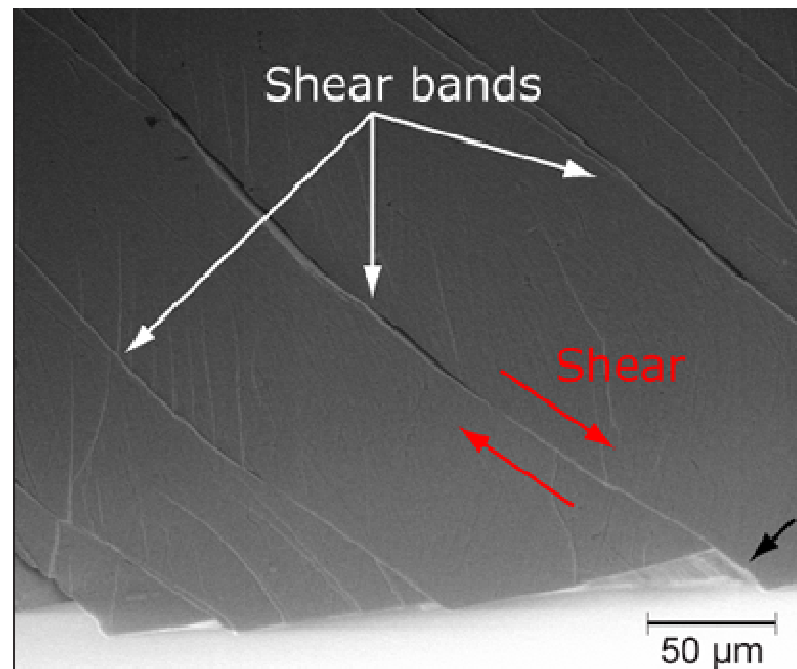
---

## MECÁNICA DE DEFORMACIÓN

- **Bandas de corte:**

Concentración de deformación de corte en bandas estrechas.

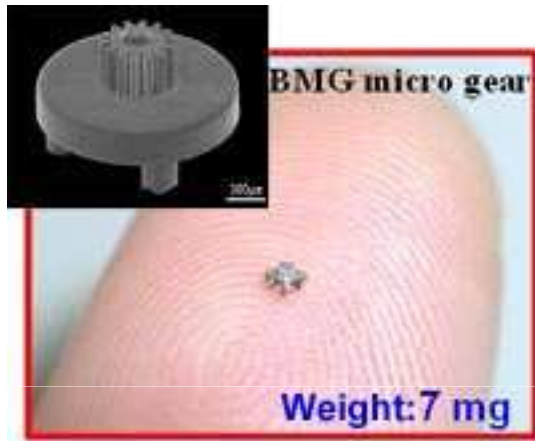
Su desarrollo pueden causar la fractura frágil del material.



# Introducción

---

## ALGUNAS APLICACIONES



# Introducción

---

## OBJETIVOS

- **Comprender el comportamiento mecánico:**  
En régimen elasto-plástico, grandes deformaciones y a diferentes temperaturas.  
Altas velocidades de deformación  
Determinar: tensión-deformación, parámetros constitutivos, dependencia con la temperatura.
- **Controlar y por consiguiente mejorar la dinámica de la plasticidad**

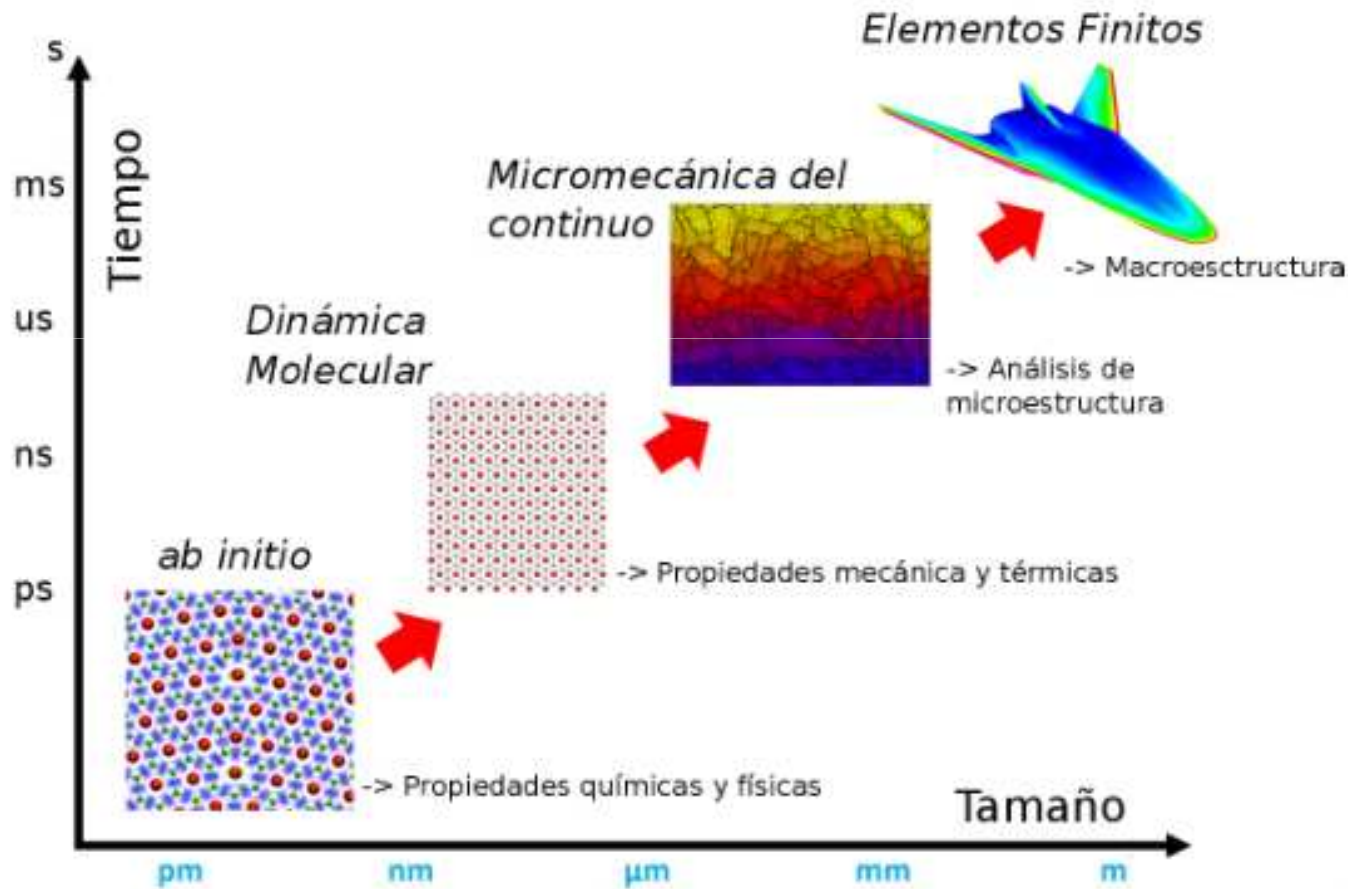
Proyecto "Estudio de materiales amorfos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2011-2013.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.



# Introducción

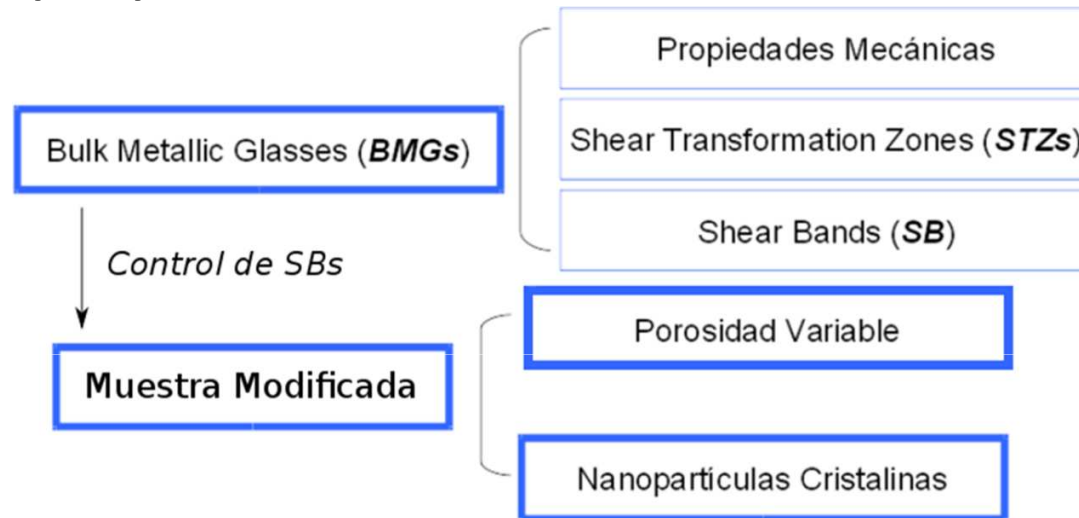
## METODOLOGÍA



# Introducción

## METODOLOGÍA

- Régimen elastoplástico a escala nanométrica mediante dinámica molecular (MD).



- **Dinámica molecular (MD)**
  - Resuelve ecuaciones de Newton para un sistema de  $N$  átomos que interactúan según una función potencial.
  - Permite estudiar propiedades a escala nanométrica, tales como la deformación, la tensión, la temperatura, entre otras.

Proyecto "Estudio de materiales amorfos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2011-2013.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.

# Caracterización de un BMG

---

## DATOS DE LA SIMULACIÓN

LAMMPS: Open Source ([lammmps.sandia.gov](http://lammmps.sandia.gov)).

Muestra:  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{54}$

160k átomos.

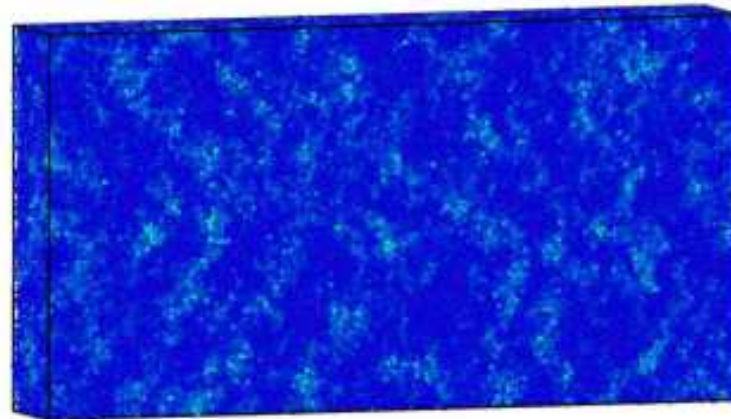
Velocidad de enfriamiento de 10<sup>12</sup>K/s (Arman et al., 2010).

Velocidad de deformación: 10<sup>9</sup>/s (Arman et al., 2010).

Potencial EAM (embedded atom method) (Daw,1984).

Tracción y compresión.

Condiciones de borde: periódicas.

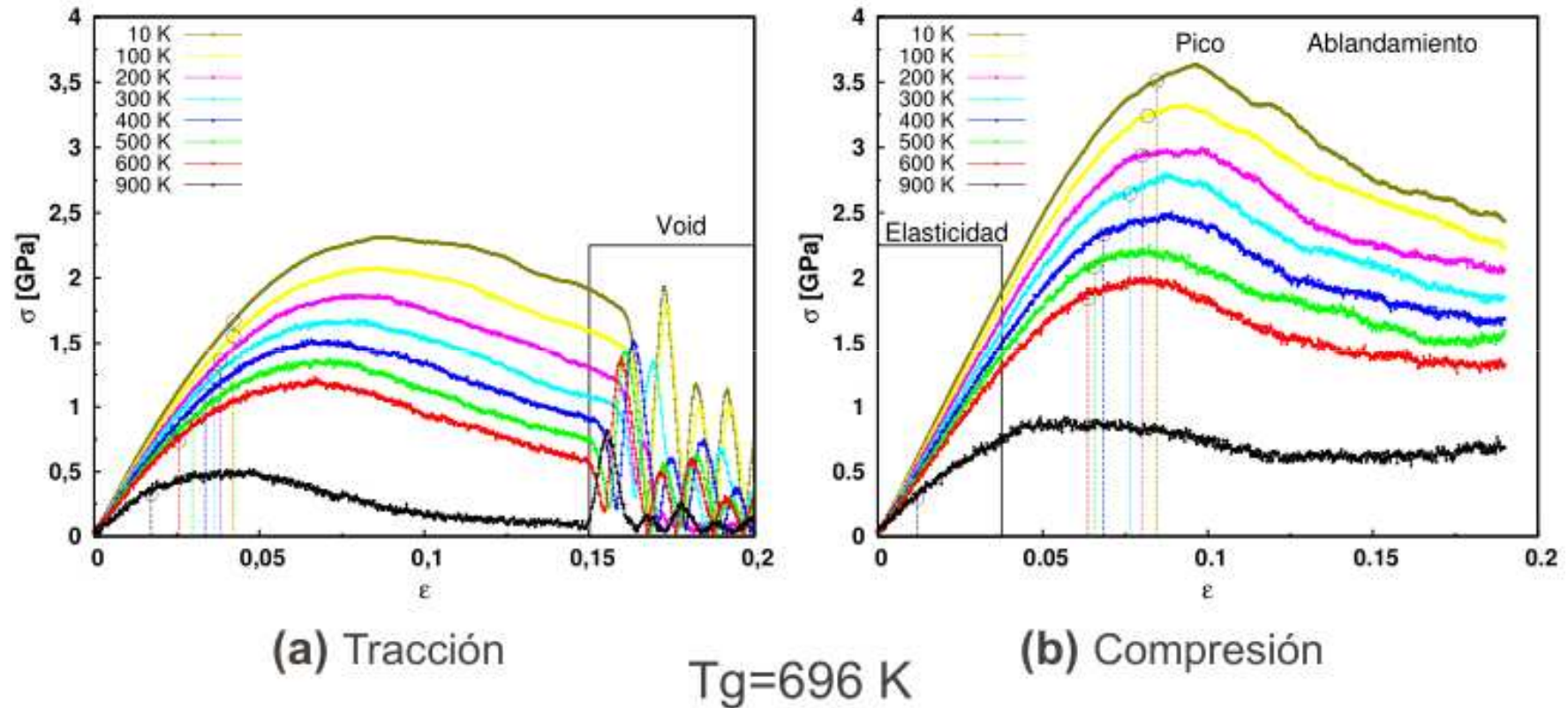


Arman B., Luo S.-N., Germann T.C. and Cağın T. *Phys. Rev. B.*, 81, 144201 (2010).

Daw M. and Baskes M.I.. *Phys. Rev. B.*, 29, 6443-6453 (1984).

# Caracterización de un BMG

## RESULTADOS



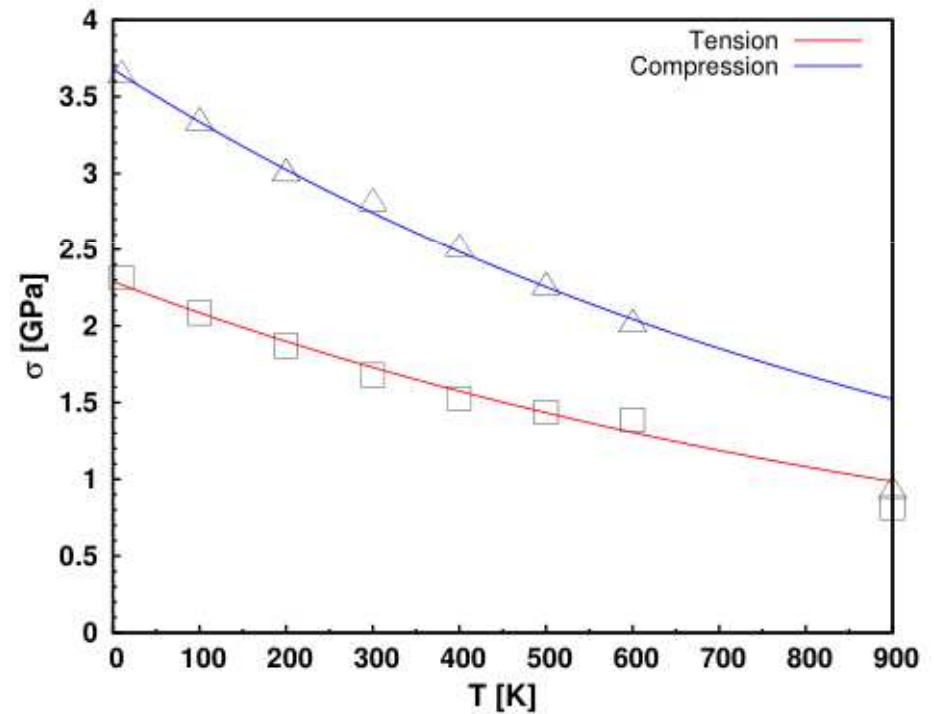
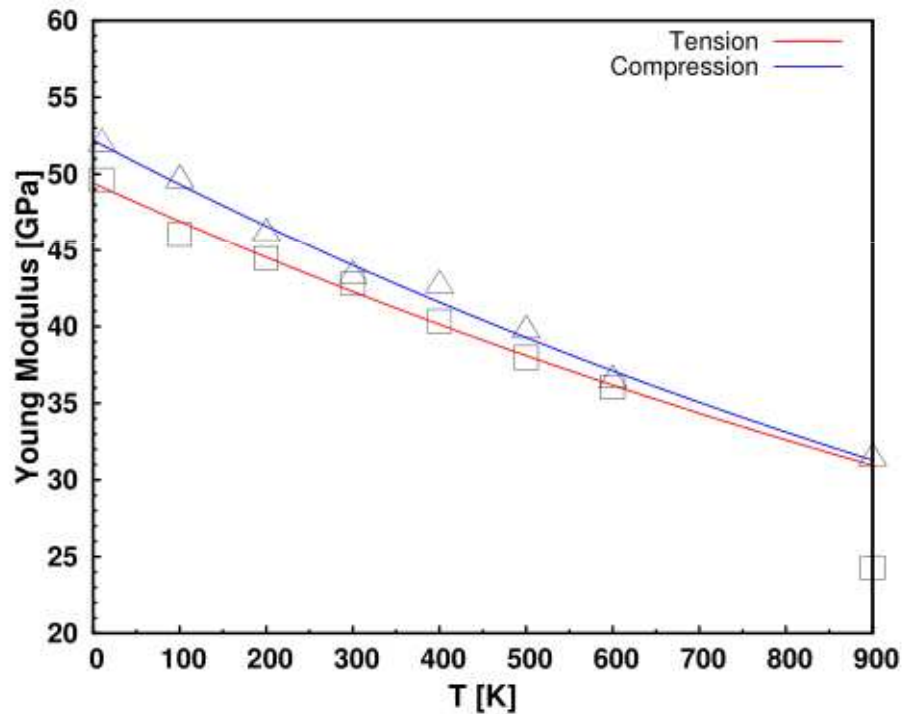
Ardiani, F., Manelli, A., Ruestes, C., Careglio and Bringa, E.; "Atomistic simulations of amorphous metals in the elastoplastic regimen". Mecánica Computacional, XXXI, AMCA, 2012, ISSN 1666-6070.

Proyecto "Estudio de materiales amorfos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2011-2013.

# Caracterización de un BMG

## RESULTADOS

$$y=A_1e^{(-T/T_0)}$$



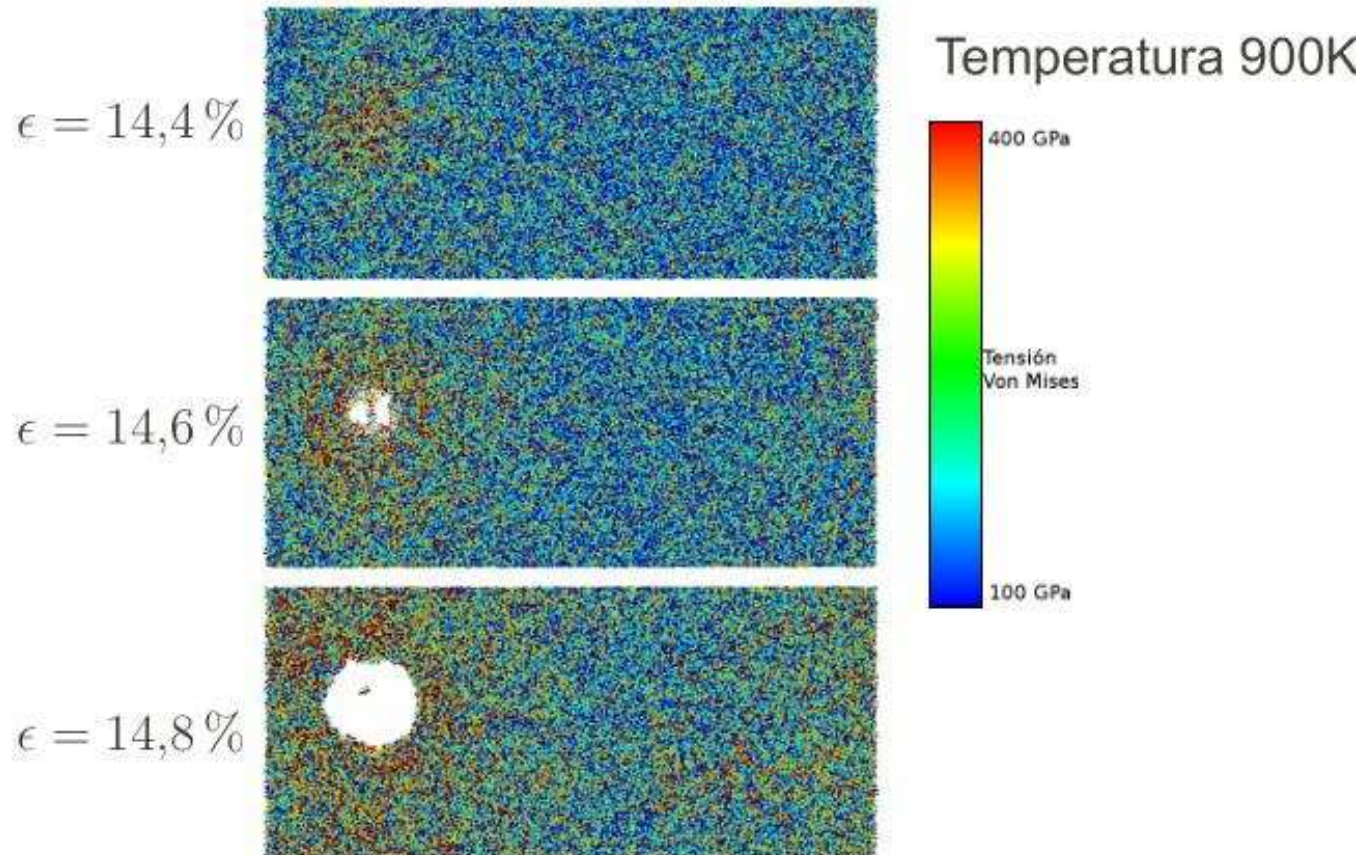
Ardiani, F., Manelli, A., Ruestes, C., Careglio and Bringa, E.; "Atomistic simulations of amorphous metals in the elastoplastic regimen". Mecánica Computacional, XXXI, AMCA, 2012, ISSN 1666-6070.

Proyecto "Estudio de materiales amorfos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2011-2013.



# Caracterización de un BMG

## RESULTADOS



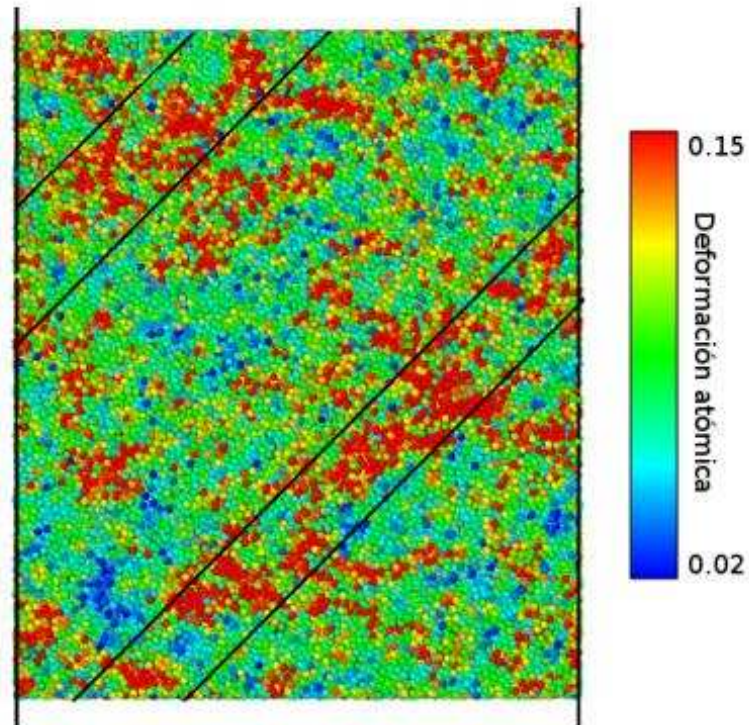
Ardiani, F., Manelli, A., Ruestes, C., Careglio and Bringa, E.; "Atomistic simulations of amorphous metals in the elastoplastic regimen". Mecánica Computacional, XXXI, AMCA, 2012, ISSN 1666-6070.

Proyecto "Estudio de materiales amorfos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2011-2013.

# Caracterización de un BMG

---

## RESULTADOS

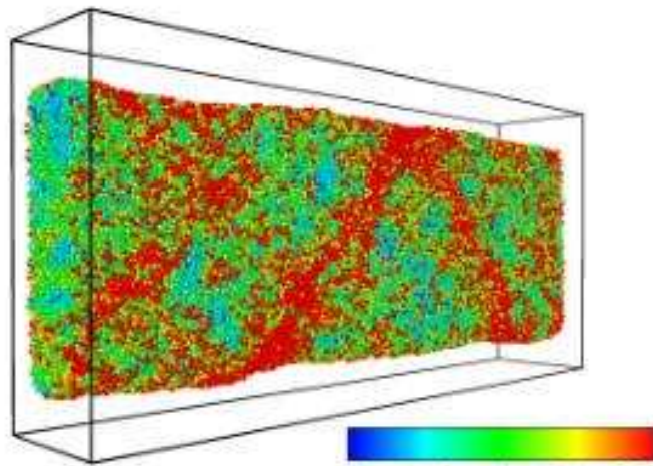


Compresión.  $T = 300K$ .  $\epsilon = 14\%$

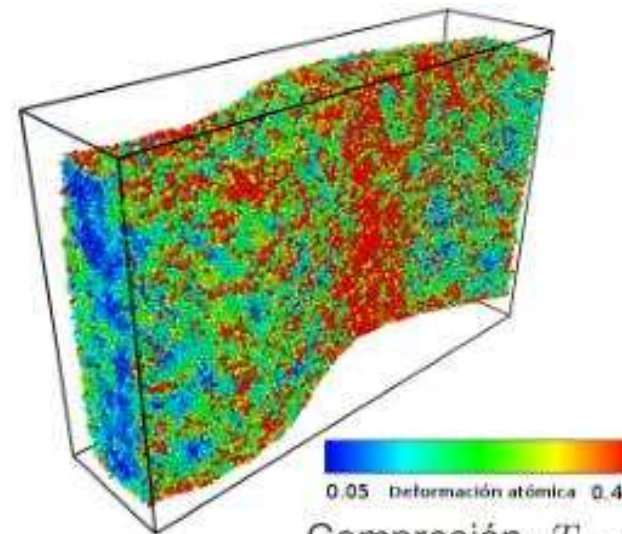
# Caracterización de un BMG

## RESULTADOS

Condiciones libres:



Tracción.  $T = 300K$ .  $\epsilon = 20\%$



Compresión.  $T = 300K$ .  
 $\epsilon = 15\%$



# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

---

## DATOS DE LA SIMULACIÓN

Muestra de  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{54}$  caracterizada anteriormente.

Inclusiones esféricas de cobre FCC y cobre-circonio de fase B2.

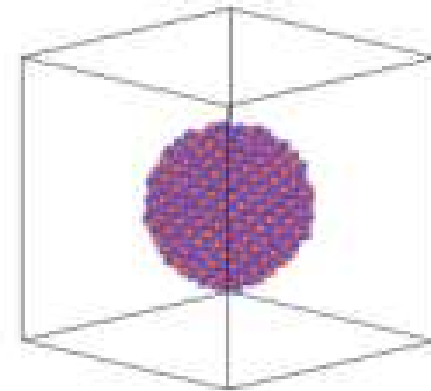
Región de 2 nm de radio es eliminada de la muestra en una posición central, la cual fue luego llenada con la red cristalina correspondiente.

Para el caso Cu-FCC una red cristalina FCC con una constante de red de 0.3615 nm y para el caso CuZr-B2 una red cristalina estabilizada previamente.

Velocidad de deformación:  $10^9/\text{s}$

Tracción y compresión.

Condiciones de borde: periódicas.



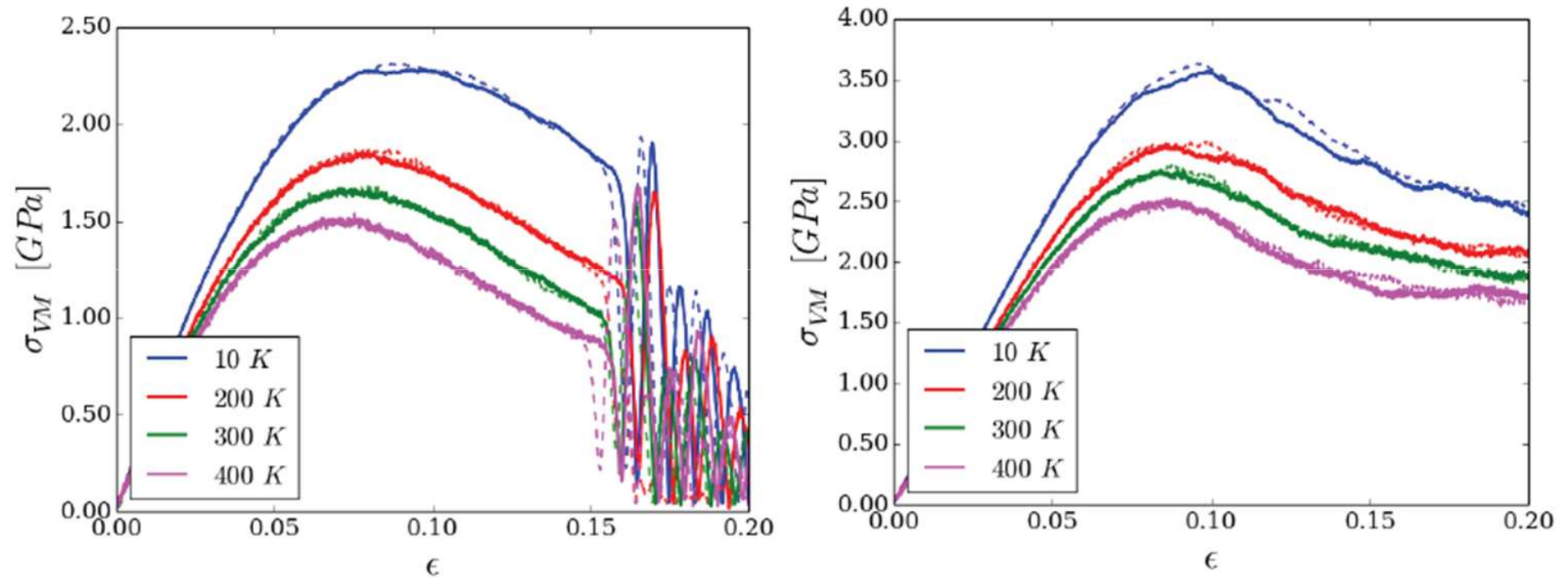
Manelli, A., Ardiani, F., Careglio, C. and Bringa, E.; "Mechanical properties of a  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{54}$  bulk metallic glass with embedded crystalline nano particles". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.

# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

## RESULTADOS

Tensión de von Mises vs deformación para el BMG sin inclusión (línea punteada) y una inclusión de Cu-FCC (línea sólida)



a) Tracción

b) Compresión

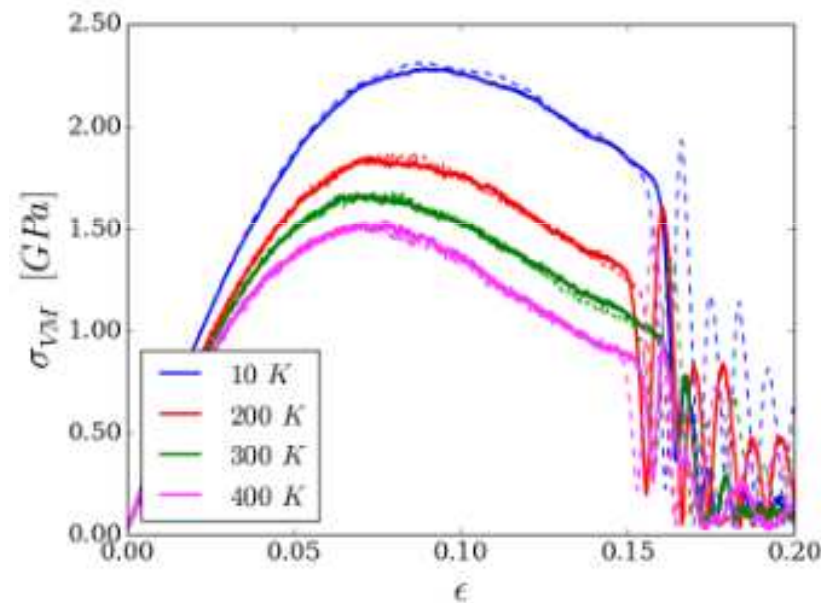
Manelli, A., Ardiani, F., Careglio, C. and Bringa, E.; "Mechanical properties of a Cu<sub>46</sub>Zr<sub>54</sub> bulk metallic glass with embedded crystalline nano particles". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.

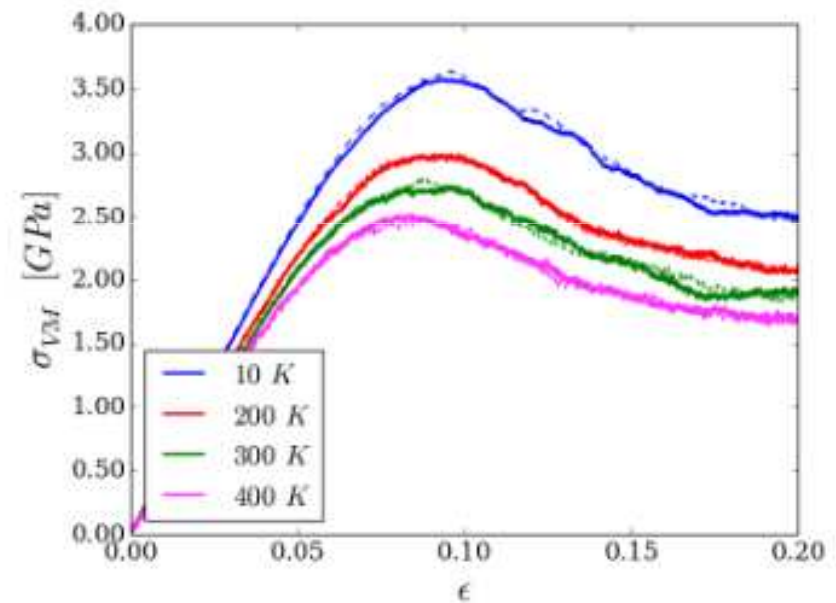
# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

## RESULTADOS

Tensión de von Mises vs deformación para el BMG sin inclusión (línea punteada) y una inclusión de CuZr-B2 (línea sólida)



(a) Tracción



(b) Compresión

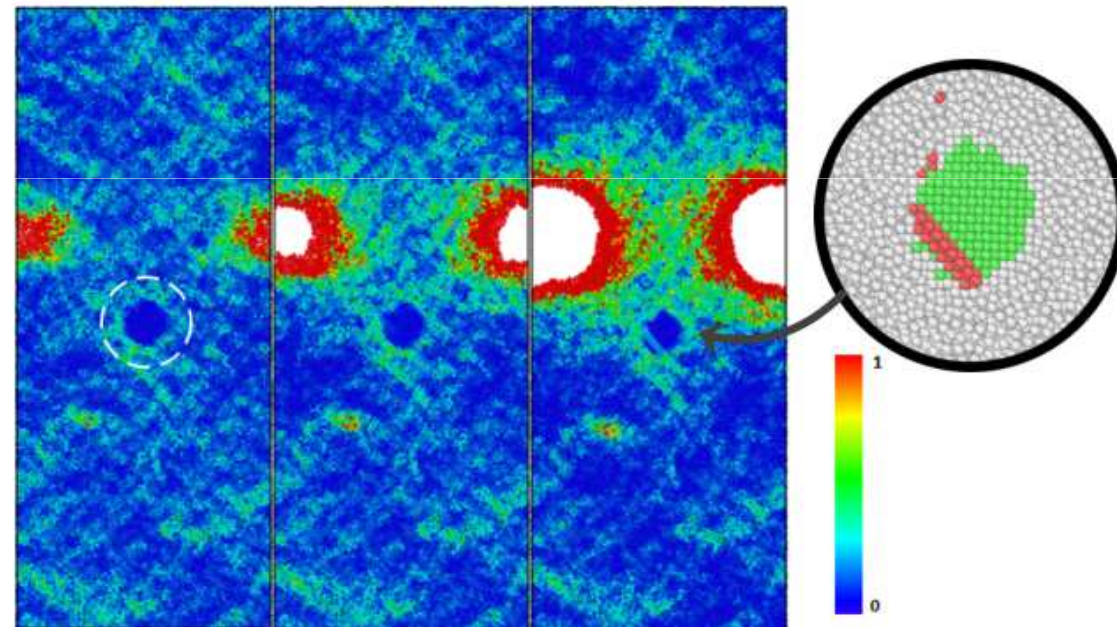
Manelli, A., Ardiani, F., Careglio, C. and Bringa, E.; "Mechanical properties of a Cu<sub>46</sub>Zr<sub>54</sub> bulk metallic glass with embedded crystalline nano particles". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.

# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

## RESULTADOS

Inclusión de Cu-FCC bajo tracción a 10K según deformación atómica  
(De izquierda a derecha:  $\epsilon = 16.66\%$ ,  $16.68\%$  y  $16.70\%$ ).



Manelli, A., Ardiani, F., Careglio, C. and Bringa, E.; "Mechanical properties of a Cu<sub>46</sub>Zr<sub>54</sub> bulk metallic glass with embedded crystalline nano particles". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.



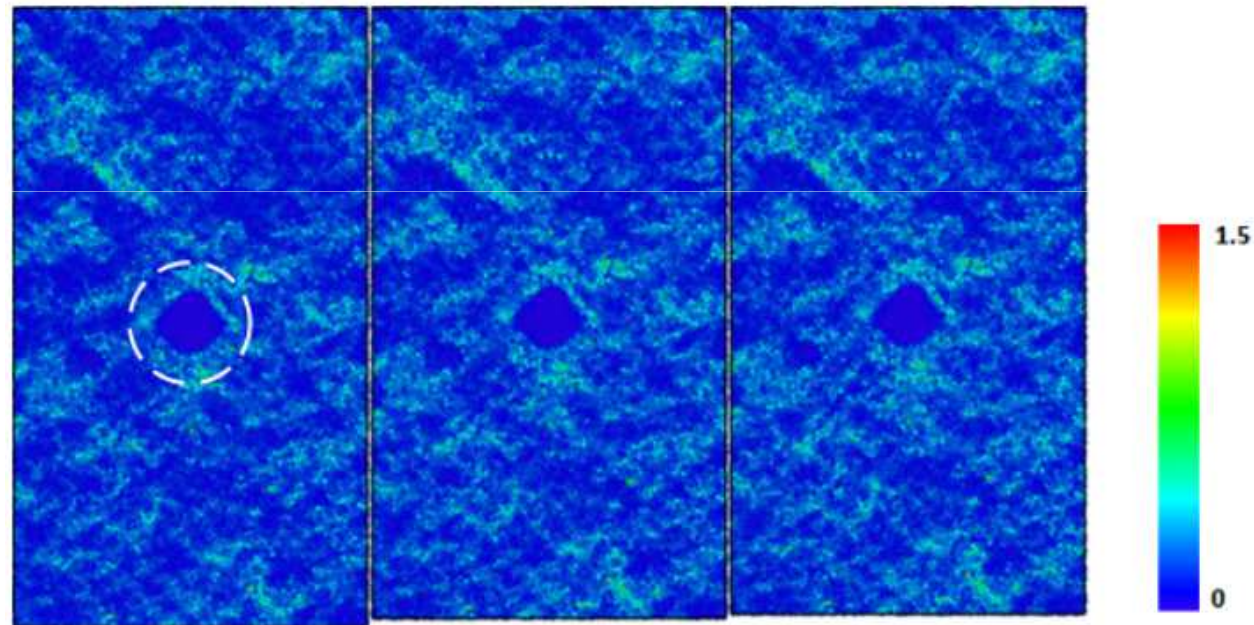
# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

---

## RESULTADOS

Inclusión de Cu-FCC bajo compresión a 10K según deformación atómica

(De izquierda a derecha:  $\epsilon = 16.74\%$ ,  $16.86\%$  y  $16.92\%$ ).



Manelli, A., Ardiani, F., Careglio, C. and Bringa, E.; "Mechanical properties of a Cu<sub>46</sub>Zr<sub>54</sub> bulk metallic glass with embedded crystalline nano particles". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.

Proyecto "Estudio de posibles mejoras de las propiedades mecánicas de vidrios metálicos", SECTYP, Universidad Nacional de Cuyo, 2013-2016.

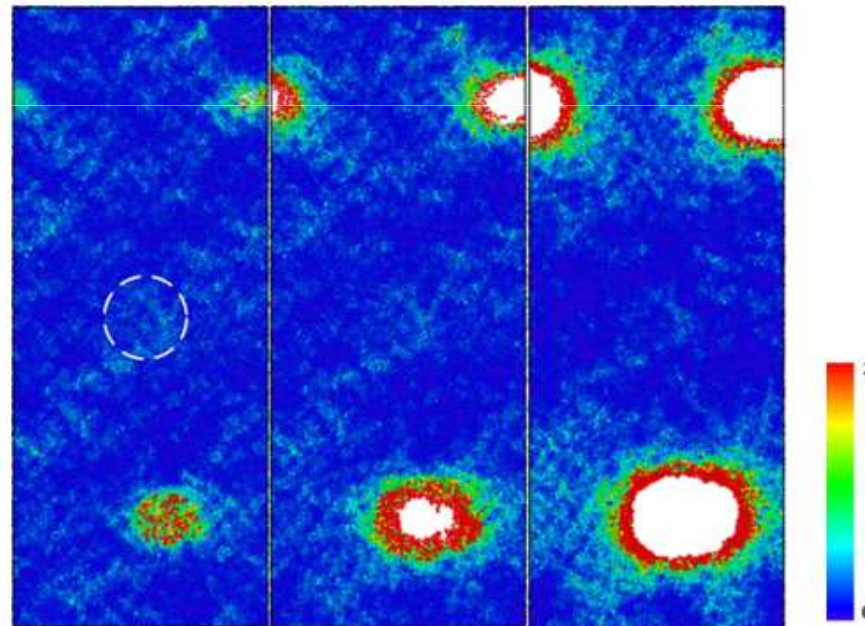
# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

---

## RESULTADOS

Inclusión de CuZr-B2 bajo tracción a 10K según deformación atómica

(De izquierda a derecha:  $\epsilon = 16.66\%$ ,  $16.68\%$  y  $16.70\%$ ).



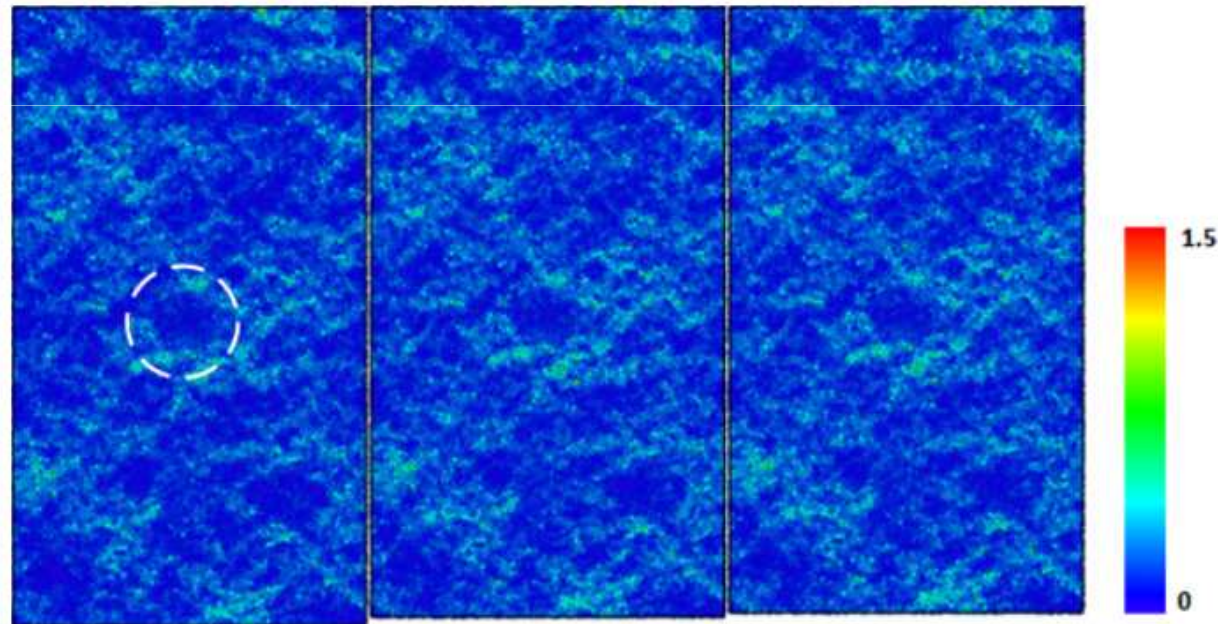
# BMG con nanopartículas cristalinas embebidas

---

## RESULTADOS

Inclusión de CuZr-B2 bajo compresión a 10K según deformación atómica

(De izquierda a derecha:  $\epsilon = 16.74\%$ ,  $16.86\%$  y  $16.92\%$ ).



# BMG poroso sinterizado (nanovidrio)

---

## DATOS DE LA SIMULACIÓN

Muestra de  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{54}$  caracterizada anteriormente.

Se realizar procedimientos similares a los experimentales (Zuo et al., 2003):

1. Ubicación aleatoria de partículas de 2.5 nm de radio.
2. Estabilización a 650K (volumen constante, pocos ps).
3. Hasta 10 ps de compresión (400 bar).
4. Repetición pasos 2 y 3 → Extracción
5. Más relajación: temple a temperatura 0, disminución de presión a 0, calentamiento hasta 300K y reducción de presión a 0. Cambios de T:  $6,5 \cdot 10^{14}$  K/s.

Velocidad de deformación:  $10^9$ /s

Tracción y compresión.

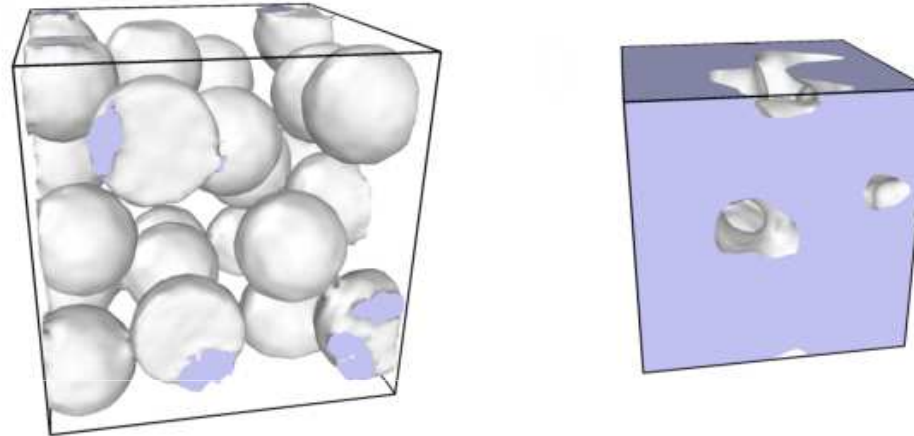
Condiciones de borde: periódicas.



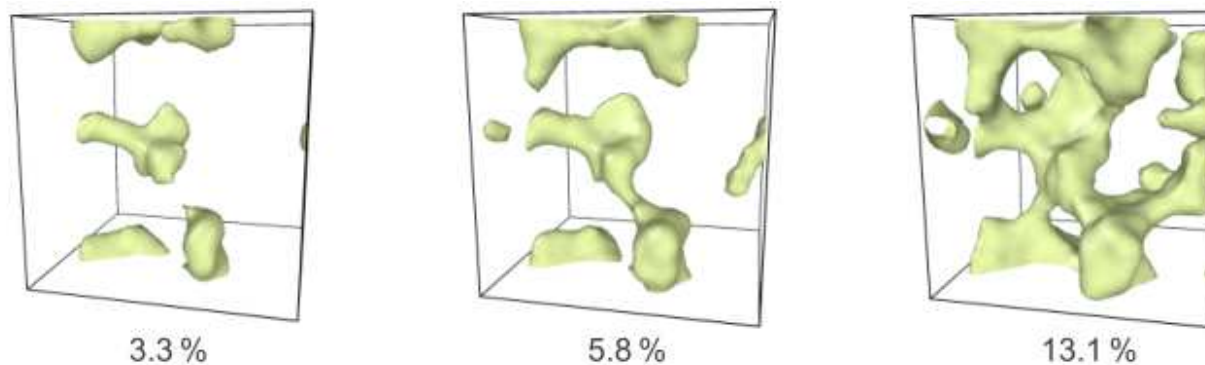
# BMG poroso sinterizado (nanovidrio)

## OBTENCIÓN DE LA MUESTRA

Muestra antes y después del proceso de sinterización:



Diferentes porcentajes de porosidad:



Ardiani, F., Manelli, A., Ruestes, C., Careglio and Bringa, E.; "Atomistic study of the mechanical properties of a sintered bulk metallic glass (nanoglass)". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.

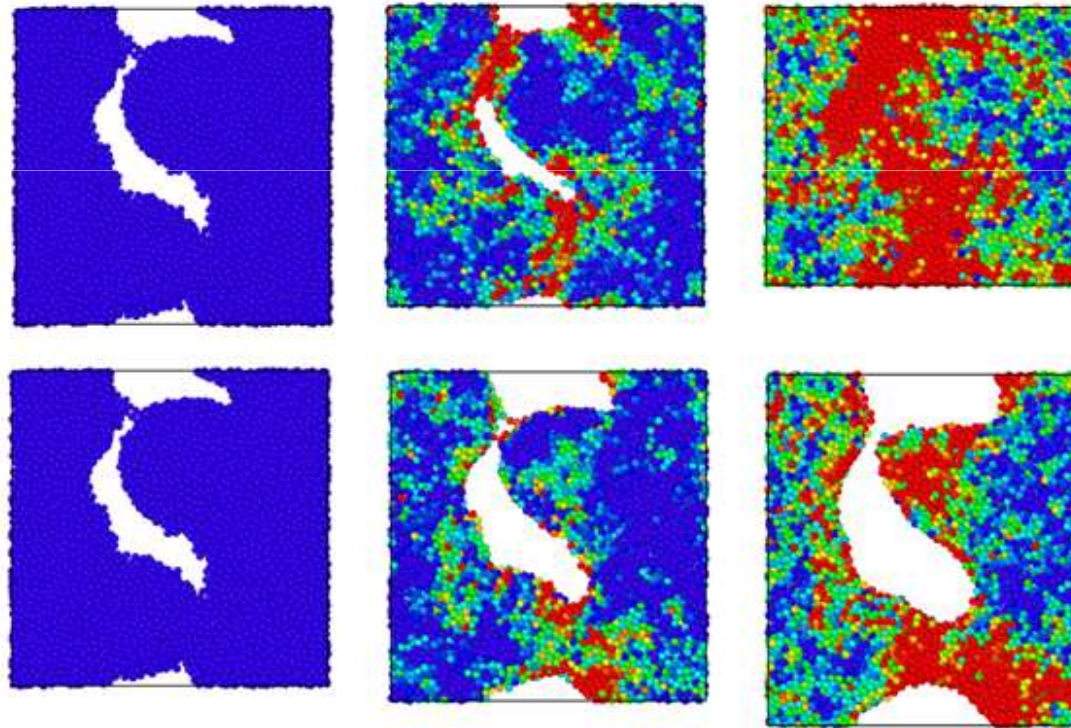
# BMG poroso sinterizado (nanovidrio)

---

## RESULTADOS

Distribuciones de deformaciones de corte para porosidad del 13% y estados de carga en compresión y tracción:

(De izquierda a derecha:  $\varepsilon = 0\%$ , 5% y 12%).



Ardiani, F., Manelli, A., Ruestes, C., Careglio and Bringa, E.; "Atomistic study of the mechanical properties of a sintered bulk metallic glass (nanoglass)". Proceedings of the 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015, ISBN: 978-849439282-5. Indexado en Scopus.