

## Flow-induced anisotropy in metallic glasses

### Researchers:

- Daniel Crespo. Departamento de Física, [Universidad Politécnica de Catalunya](#) [1].
- Eloi Pineda. Departamento de Física, [Universidad Politécnica de Catalunya](#) [1].
- Jorge E. Velasco. Departamento de Física, [Universidad Politécnica de Catalunya](#) [1].
- Amadeu Concustell. Centro de proyección térmica, [Universidad de Barcelona](#) [2]

Idioma Indefinido

### Descrição:

Se denominan vidrios metálicos a los materiales amorfos compuestos mayoritariamente por elementos metálicos. Los vidrios metálicos fueron descubiertos en 1960, y desde entonces han sido objeto de gran interés científico a causa de sus peculiares propiedades. La falta de estructura cristalina permite obtener materiales con resistencia mecánica superior a aleaciones cristalinas de composición similar, y también se han obtenidos excelentes aleaciones magnéticas blandas, que se utilizan en transformadores de muy bajas pérdidas.

Los vidrios metálicos se producen por enfriamiento rápido, de forma similar a los vidrios tradicionales basados en óxido de Silicio. Durante el enfriamiento la viscosidad del líquido aumenta varios ordenes de magnitud, y cuando la viscosidad supera un valor crítico el líquido sobreenfriado queda cinemáticamente “congelado”. Es decir, el material conserva la estructura atómica del líquido del que procede. Este proceso se conoce como transición vítrea, y es uno de los problemas abiertos en la investigación de la física de materiales. Se trata de un problema complejo de mecánica estadística no estacionaria, y por este motivo la simulación numérica mediante Dinámica Molecular es una técnica muy valiosa en su estudio, complementando la información experimental.

La dinámica de los vidrios por debajo de la transición vítrea es también objeto de intensa investigación. Dado que se trata de materiales fuera del equilibrio termodinámico sufren procesos de relajación hacia estructuras termodinámicamente más estables, en tiempos de relajación que van desde segundos hasta cientos de años. La comprensión de estos procesos es esencial para comprender su respuesta en condiciones de servicio, y por lo tanto para definir sus posibles aplicaciones tecnológicas.

Experimentos recientes han mostrado que la aplicación de esfuerzos mecánicos sobre un vidrio metálico puede generar anisotropía atómica. De este modo, tras la aplicación del esfuerzo se generan direcciones privilegiadas en el vidrio, y las propiedades mecánicas del material en las diferentes direcciones se ven afectadas. Para analizar este fenómeno, el grupo de investigación ha realizado un experimento utilizando radiación Sincrotrón en ESRF (European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Francia), en el que se ha analizado la respuesta estructural de la aleación amorfa Pd<sub>42.5</sub>Ni<sub>7.5</sub>Cu<sub>30</sub>P<sub>20</sub>. Se escogió este material porque se trata de un vidrio metálico dúctil, estable en un amplio rango de temperaturas y resistente a la oxidación.

### Objectives:

En el proyecto de investigación Flow-induced anisotropy in metallic glasses se simula un vidrio metálico similar al que se ha analizado experimentalmente para comparar los resultados obtenidos mediante simulación numérica de Dinámica Molecular con los resultados experimentales obtenidos mediante radiación Sincrotrón.

La principal diferencia entre las medidas experimentales y la simulación mediante dinámica molecular proviene de las diferentes escalas temporales. Las medidas experimentales se realizan en tiempos de algunos segundos o minutos, mientras que mediante dinámica molecular se pueden llegar a simular tiempos del orden de algunos nanosegundos. Por esta razón, la dinámica molecular solo se puede comparar cualitativamente con los resultados experimentales.

Experimentalmente se obtienen velocidades de deformación entre  $10^{-2}$  s<sup>-1</sup> y  $10^{-4}$  s<sup>-1</sup>. Es decir, se requieren entre 100 s y 10000 s para obtener una deformación de la muestra del 100%. Las deformaciones máximas estudiadas son del 5%. Hasta el momento, mediante dinámica molecular se han simulado velocidades de deformación entre  $10^{12}$  y  $10^{10}$  s; la deformación del 100% de la muestra se conseguiría en tiempos entre 0,001 ns y 0,1 ns. En estas simulaciones se ha observado la aparición de anisotropía con deformaciones de hasta el 10% de la muestra. Para deformaciones superiores se observa la creación de bandas de cizalla (shear bands), ampliamente documentadas en la bibliografía.

El objetivo concreto del proyecto que se está realizando en CénitS acercarse a las condiciones experimentales reduciendo la velocidad de deformación y la deformación máxima. Para ello, se están estudiando velocidades de deformación menores, de 10<sup>8</sup> s, equivalentes a una deformación del 100% de la muestra en tiempos de 10 ns. Las deformaciones máximas a estudiar serán del 2%, 5% y 10%, dado que no estamos interesados en el estudio de las bandas de cizalla.

### Methodology:

La simulación se realiza utilizando el software lammps, y potenciales tipo embedded atom method, que han demostrado ser adecuados para el estudio de metales, tanto en fase cristalina como amorfa. Lamentablemente, no se dispone de potenciales para el Fósforo, por lo que se está simulando la composición Pd<sub>53</sub>Ni<sub>34</sub>Cu<sub>13</sub>, con la misma proporción entre los elementos metálicos.

### Funding sources:

El proyecto se financia a través de la Red Española de Supercomputación, referencia QCM-2015-3-0038.

---

**URL de origem:**<https://web.computaex.es/pt-pt/proyectos/flow-induced-anisotropy-metallic-glasses>

**Ligações**

[1] <http://www.upc.edu/> [2] <http://www.ub.edu/>