

# Tabla de contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Vidrios metálicos . . . . .	1
1.1.1. Métodos de fabricación . . . . .	2
1.1.2. Propiedades mecánicas y deformación de los vidrios metálicos . . . . .	3
1.1.3. Simulaciones computacionales . . . . .	5
1.2. Hipótesis . . . . .	5
1.3. Objetivo general . . . . .	6
1.4. Objetivos específicos . . . . .	6
<b>2. Metodología</b>	<b>7</b>
2.1. Dinámica Molecular . . . . .	7
2.1.1. Principios básicos . . . . .	7
2.1.2. Potencial interatómico . . . . .	8
2.2. Caracterización . . . . .	9
2.2.1. Simulación de la temperatura de transición vítrea . . . . .	12
2.2.2. Cálculo de la temperatura . . . . .	13
2.2.3. Función de distribución radial de pares . . . . .	13
2.2.4. Número de coordinación . . . . .	14
2.2.5. Análisis de ángulos . . . . .	15
2.2.6. Análisis de poliedros de Voronoi . . . . .	16
2.2.7. Deformación atómica local . . . . .	16
2.3. Modelos de muestras de vidrio metálico . . . . .	18
2.4. Modelo de la compresión de columnas de vidrio metálico . . . . .	19
2.5. Modelo del impacto de nanopartículas de vidrio metálico . . . . .	20
<b>3. Modelos de muestras de vidrio metálico basados en cobre y zirconio</b>	<b>22</b>
3.1. Transición vítrea . . . . .	22
3.2. Propiedades estructurales . . . . .	27
3.2.1. Distribución de pares . . . . .	27
3.2.2. Número de coordinación . . . . .	31
3.2.3. Distribución de ángulos . . . . .	34
3.2.4. Análisis de poliedros de Voronoi . . . . .	36
3.3. Resumen del capítulo . . . . .	40

<b>4. Compresión de nano-estructuras de vidrio metálico</b>	<b>42</b>
4.1. Detalle de las simulaciones . . . . .	43
4.2. Efecto de la temperatura en la deformación . . . . .	45
4.3. Efecto de la velocidad de la deformación . . . . .	48
4.4. Efecto de la inclusión de nanopartículas cristalinas . . . . .	51
4.5. Inestabilidad estructural, pandeo de nano-alambres . . . . .	59
4.6. Resumen del capítulo . . . . .	65
<b>5. Impacto de nanopartículas sobre un sustrato ambos de vidrio metálico basado en cobre y zirconio</b>	<b>66</b>
5.1. Detalle de las simulaciones . . . . .	66
5.2. Incrustación de la nanopartícula en el sustrato a diferentes velocidades iniciales. . . . .	69
5.3. Temperatura durante el impacto. . . . .	76
5.4. Estabilidad de nanocristales preexistentes en el sustrato durante el impacto. . . . .	78
5.5. Resumen del capítulo . . . . .	80
<b>6. Conclusiones</b>	<b>81</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>83</b>

# Índice de figuras

1.1. Esquema del proceso de aspersión dinámica de gas frío. . . . .	3
2.1. Potencial de pares de la aleación Zr-Cu-Al . . . . .	10
2.2. Función de embebido de la aleación Zr-Cu-Al . . . . .	10
2.3. Densidad electrónica de la aleación Zr-Cu-Al . . . . .	11
2.4. Energía cohesiva de la aleación Zr-Cu-Al . . . . .	11
2.5. Esquema mostrando la dependencia entre volumen y temperatura cuando varían las velocidades de enfriamiento. . . . .	12
2.6. Ejemplo de una función de distribución de pares de un modelo de muestra de cobre. a) Red cristalina FCC del modelo de cobre a 0 K y b) Modelo de cobre a una temperatura de 2000 K. . . . .	14
2.7. Esquema del tratamiento térmico de <i>melting-quenching</i> utilizado para producir las muestras del vidrio metálico $(\text{CuZr})_{100-x}\text{Al}_x$ . . . . .	18
2.8. Configuración inicial del ensayo de compresión . . . . .	19
2.9. Configuración inicial del ensayo de impacto . . . . .	20
3.1. Volumen de la celda de simulación versus temperatura para el vidrio metálico $(\text{Zr}_{50}\text{Cu}_{50})_{100-x}\text{Al}_x$ para diferentes concentraciones de aluminio en la aleación. . . . .	23
3.2. Volumen de la celda de simulación versus temperatura para el vidrio metálico $\text{Zr}_{45}\text{Cu}_{45}\text{Al}_{10}$ para diferentes tasas de enfriamiento en la colectividad NPT. En el inserto se muestra que para las velocidades de enfriamiento más rápidas (170 K/ps y 17 K/ps) el sistema se sigue comprimiendo a 300 K. Por esta razón, deben ser evitadas las simulaciones con tasas de enfriamiento elevadas. . . . .	24
3.3. Temperatura de transición vítrea versus velocidad de enfriamiento del vidrio metálico $\text{Zr}_{45}\text{Cu}_{45}\text{Al}_{10}$ . . . . .	25
3.4. Temperatura de transición vítrea versus concentración de aluminio para dos diferentes tasas de enfriamiento. . . . .	26
3.5. Función de distribución de pares del vidrio metálico $\text{Zr}_{45}\text{Cu}_{45}\text{Al}_{10}$ a diferentes temperaturas durante el enfriamiento a una razón de 0.17 K/ps. La curva gris muestra la función de distribución de pares de un modelo cristalino de $\text{Zr}_{45}\text{Cu}_{45}\text{Al}_{10}$ a una temperatura de 300K. . . . .	27

3.6.	Función de distribución de pares parciales del vidrio metálico ZrCuAl variando la concentración de aluminio con una tasa de enfriamiento de 0.17 K/ps y a la temperatura final de 300 K. . . . .	28
3.7.	Función de distribución de pares parciales del vidrio metálico ZrCuAl variando la concentración de aluminio con una tasa de enfriamiento de 17 K/ps y a la temperatura final de 300 K. . . . .	29
3.8.	Función de distribución de pares parciales a) Zr-Zr, b) Zr-Cu y c) Cu-Cu, del vidrio metálico ZrCuAl variando la tasa de enfriamiento entre 0.017 K/ps y 170 K/ps y a la temperatura final de 300 K. . . . .	29
3.9.	Función de distribución de pares parciales a) Zr-Al, b) Cu-Al y c) Al-Al, del vidrio metálico ZrCuAl variando la tasa de enfriamiento entre 0.017 K/ps y 170 K/ps y a la temperatura final de 300 K. . . . .	30
3.10.	Efecto de la variación del aluminio de la composición del vidrio metálico $(ZrCu)_{100-x}Al_x$ en el número de coordinación. La velocidad de enfriamiento de la muestras fue de 0.17 K/ps. . . . .	32
3.11.	Número de coordinación parciales del vidrio metálico $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ variando la velocidad de enfriamiento de las muestras. . . . .	33
3.12.	Distribución de ángulos entre átomos del vidrio metálico $(ZrCu)_{100-x}Al_x$ con una tasa de enfriamiento de 0.17 K/ps y a la temperatura final de 300 K. . . . .	34
3.13.	Distribución de ángulos entre átomos de la aleación $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ en estado cristalino a una temperatura de 300 K. . . . .	35
3.14.	Número de poliedros de Voronoi. a) Vidrio metálico ZrCu enfriado a una tasa de 0.17 K/ps, b) $ZrCuAl_{10}$ enfriado a 0.17 K/ps. c) ZrCu enfriado a 17 K/ps y d) $ZrCuAl_{10}$ enfriado a una tasa de 17 K/ps. . . . .	37
3.15.	Número de caras de poliedros de Voronoi centrados en Zr, Cu y Al del vidrio metálico $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ variando la velocidad de enfriamiento de la muestra. . . . .	37
3.16.	Número de caras pentagonales de los poliedros de Voronoi centrados en Zr, Cu y Al del vidrio metálico $(ZrCu)_{100-x}Al_x$ variando la concentración del aluminio en las muestras. . . . .	38
3.17.	Número de caras pentagonales de los poliedros de Voronoi centrados en Zr, Cu y Al del vidrio metálico $(ZrCu)_{100-x}Al_x$ variando la concentración del aluminio en las muestras. La velocidad de enfriamiento de la muestra fue de 0.17 K/ps. . . . .	38
3.18.	Fracción de poliedros de Voronoi centrado en Zr más frecuentes para diferentes concentraciones de Al a una velocidad de enfriamiento de 0.17 K/ps. . . . .	39
3.19.	Fracción de poliedros de Voronoi centrado en Cu más frecuentes para diferentes concentraciones de Al a una velocidad de enfriamiento de 0.17 K/ps. . . . .	39
3.20.	Fracción de poliedros de Voronoi centrado en Al más frecuentes para diferentes concentraciones de Al a una velocidad de enfriamiento de 0.17 K/ps. . . . .	40
4.1.	Modelo inicial de un nano-alambre del vidrio $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ . . . . .	44
4.2.	Curva de esfuerzo-deformación para una nano-columna del vidrio $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ a diferentes temperaturas. . . . .	45

4.3.	Deformación atómica local de los nanoalambres del vidrio metálico $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ variando la temperatura del nanoalambre. . . . .	46
4.4.	Deformación atómica local de los nanoalambres del vidrio metálico $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ variando la velocidad de la deformación a una temperatura de 300 K. . . . .	49
4.5.	Curva de esfuerzo-deformación para una nanocolumna de amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ variando la velocidad de deformación. . . . .	50
4.6.	Curva de esfuerzo-deformación para una nanocolumna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ . La tasa de deformación es de $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ a una temperatura de 10 K. . . . .	51
4.7.	Deformación atómica local para una nanocolumna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ con tres nanopartículas de cobre de 2.2 nm de radio. . . . .	53
4.8.	Deformación atómica local de un corte logitudinal de una nanocolumna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ con nanopartículas de cobre de 2.2 nm de radio. . . . .	54
4.9.	Análisis de vecinos comunes de las nanopartículas de cobre de 2.2 nm de radio que se encuentran al interior de la nano-columna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ . . . . .	55
4.10.	Deformación atómica local para una nano-columna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ con nanopartículas de cobre de 4.5 nm de radio. . . . .	56
4.11.	Deformación atómica local de un corte logitudinal de una nano-columna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ con nanopartículas de cobre de 4.5 nm de radio. . . . .	57
4.12.	Análisis de vecinos comunes de las nanopartículas de cobre de 4.5 nm de radio que se encuentran al interior de la nano-columna del amorfo $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ . . . . .	58
4.13.	Curva de esfuerzo-deformación para un nanoalambre de diámetro de 2.46 nm. . . . .	60
4.14.	Deformación atómica local de un nano-alambre del vidrio metálico $Zr_{45}Cu_{45}Al_{10}$ . . . . .	61
4.15.	Deformación atómica local durante el pandeo del nano-alambre . . . . .	62
4.16.	Curvas $\sigma - \epsilon$ en la compresión de nano-alambres de diametro 3.28 nm . . . . .	63
4.17.	Esfuerzo crítico versus largo de los nano-alambres . . . . .	64
5.1.	Esquema del modelo de impacto . . . . .	67
5.2.	Energía potencial por átomo. Relajación antes del impacto . . . . .	67
5.3.	Temperatura antes del impacto . . . . .	68
5.4.	Imágenes de la simulación del impacto con átomos coloreados usando la deformación atómica local. Las imágenes de la izquierda fueron obtenidas en el instante de máxima penetración. . . . .	70
5.5.	Imágenes de la simulación del impacto con átomos coloreados usando la deformación atómica local. . . . .	71
5.6.	Velocidad del centro de masa de la partícula en dirección al sustrato. . . . .	72
5.7.	Coeficiente de amortiguamiento en la colisión . . . . .	73
5.8.	Velocidad de la nanopartícula modificando la temperatura inicial de las nanopartículas . . . . .	74
5.9.	$\Delta Z$ versus velocidad inicial de la nanopartícula. . . . .	75
5.10.	Temperatura de la nanopartícula durante el impacto. . . . .	76

5.11. Temperatura de la nanopartícula durante el impacto con una velocidad inicial de 2000 m/s para dos temperaturas iniciales. . . . .	77
5.12. Temperatura de la nanopartícula, sustrato y semicascarones esféricos TCZ1, TCZ2 y TCZ3. . . . .	77
5.13. Imágenes a 30 y 100 ps del impacto con nanocristales preexistentes. . . . .	78
5.14. Secuencia de imágenes de los cuatro nanocristales de Cu más cercanos al lugar del impacto. . . . .	79

# Índice de tablas

3.1. Temperatura de transición vítrea $T_g$ para la aleación $\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{45}\text{Al}_{10}$ . . . . .	25
3.2. Distancias entre pares del vidrio metálico $\text{ZrCuAl}_{10}$ . . . . .	30
4.1. Módulo elástico y límite elástico versus temperatura. . . . .	47
4.2. Módulo elástico y límite elástico versus velocidad de la deformación. . . . .	48
4.3. Módulo elástico y límite elástico versus radio de la nanopartícula. . . . .	51
4.4. Resultados del ajuste, módulo elástico superficial y tensión superficial residual. . . . .	63
5.1. Coeficiente de amortiguamiento en el impacto de la nanopartículas de vidrio metálico para dos velocidades de enfriamiento de la estructura amorfa enfriada a 17 y 0.17 K/ps. . . . .	72
5.2. Velocidad crítica para sets 1 y 2. . . . .	74