

Ultrahigh Strength in Nanocrystalline Materials Under Shock Loading

*“Materiales nanocristalinos ultraduros generados por
ondas de choque”*

Eduardo M. Bringa, et al. Science 309, 1838 (2005);
DOI:10.1126/science.1116723

Patricio L’Huissier G.

Universidad de Chile
Facultad de Ciencias
Departamento de Física

28 de Noviembre de 2008



Contenidos

1 Definiciones

2 Modelos

3 Onda de Choque

4 Simulaciones

5 Experimentos

6 Paper

Contenidos

1 Definiciones

2 Modelos

3 Onda de Choque

4 Simulaciones

5 Experimentos

6 Paper

Contenidos

- 1 Definiciones
- 2 Modelos
- 3 Onda de Choque
- 4 Simulaciones
- 5 Experimentos
- 6 Paper

Contenidos

- 1 Definiciones
- 2 Modelos
- 3 Onda de Choque
- 4 Simulaciones
- 5 Experimentos
- 6 Paper

Contenidos

- 1 Definiciones
- 2 Modelos
- 3 Onda de Choque
- 4 Simulaciones
- 5 Experimentos
- 6 Paper

Contenidos

- 1 Definiciones
- 2 Modelos
- 3 Onda de Choque
- 4 Simulaciones
- 5 Experimentos
- 6 Paper

Nanocristales(Nanocrystal)

- Partícula nanoscópica que contiene de unos pocos cientos a decenas de millares de átomos los cuales están dispuesto ordenadamente, siguiendo una estructura cristalina. Puesto que esta ordenación cristalina debe terminar en la superficie del nanocrystal, los átomos de la superficie tienen menos "vecinos" que los que están en el 'cuerpo' del nanocrystal.

Relación de Hall-Petch.

- La fuerza o dureza de los materiales cristalinos depende del tamaño del grano, ó de otra forma, el limite de elasticidad, σ_y , depende del tamaño del grano (d) de los cristales mediante la relacion:

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{K}{\sqrt{d}}$$

- Donde σ_0 es el limite de elasticidad del monocristal.
- K depende del tipo de material.

Dureza

- Las dislocaciones son los portadores de la deformación plásticas en los materiales cristalinos. La búsqueda de materiales ultraduros está cercanamente relacionado con la búsqueda de los obstáculos más efectivos al movimiento de dislocación.
- Para los granos muy pequeños (~ 12 nm) el mecanismo de deformación es diferente. Se ha propuesto que la deformación plástica no es mayormente dominada por el movimiento de la dislocación sino por el resbalar atómico de los bordes de grano.

Dureza

- Dos mecanismos de deformación activos a estos tamaños de los granos, llamados “plasticidad basada en la dislocación” y “deslizamiento de los granos” .

Material	Synthesis method*	Sample state	Size range (nm)	Critical size (nm)
Pd	IGC	Annealed	7–13	>13
Pd	IGC	Annealed	24–54	>54
Cu	IGC	Annealed	8–16	>16
Cu	IGC	Compacted	19 & 20	>20
Cu	IGC	Annealed	25–120	33
Cu	IGC	Annealed	5–30	9
TiAl	IGC	Annealed	10–700	21
TiAlNb	Ball milling	Annealed	10 & 20	>20
Al-1.5Mg	Torsion straining	Annealed	<150–13 μ m	150
FeAl	Mechanical alloying	Compacted	7–151	33–34
NbAl ₃	Mechanical alloying	Annealed	42–61	>61
Ni-P	Electrodeposition	Prepared	2–24	7
NiP	CFAS	Annealed	9–120	>120
Ni-Zr	CFAS	Annealed	8–98	22
PdCuSi	CFAS	Annealed	4–110	10
FeSiB	CFAS	Annealed	4–190	25
FeCoSiB	CFAS	Annealed	6–120	25
FeMoSiB	CFAS	Annealed	15–200	45

*: IGC-Inert gas condensation; CFAS-Crystallization from amorphous solid

Materiales granulares

- Ley de Mohr-Coulomb de la fricción de deslizamiento:
- Predice que el inicio de la plasticidad ocurre cuando el estrés aplicado es mayor que el valor definido por el flujo de estrés,

$$\sigma_{flujo} \propto (\sigma_{coh} + \alpha\sigma_{normal}),$$

donde σ_{coh} está relacionado a la cohesión de la interfase, y α está relacionado a la geometría de los granos.

- Este criterio ha sido recientemente extendido a los nanocristales. Asociando σ_{normal} con la presión.

Materiales granulares

- Con argumentos de escala presentados por Van Swygenhoven y Caro se puede escribir la dependencia de la tasa de deformación del tamaño del grano d y el flujo de estrés del deslizamiento como:

$$\sigma_{GBS} = (\sigma_0 + \alpha P)(1 + d/d_0)$$

Dislocación- plasticidad inducida por choque

- Generalmente se asume que, como en el modelo de Steinberg-Guinan, que adicionado al efecto Hall-Pech se obtiene:

$$\sigma_{Disl} = CG(P)(d/d_1)^{-0,5},$$

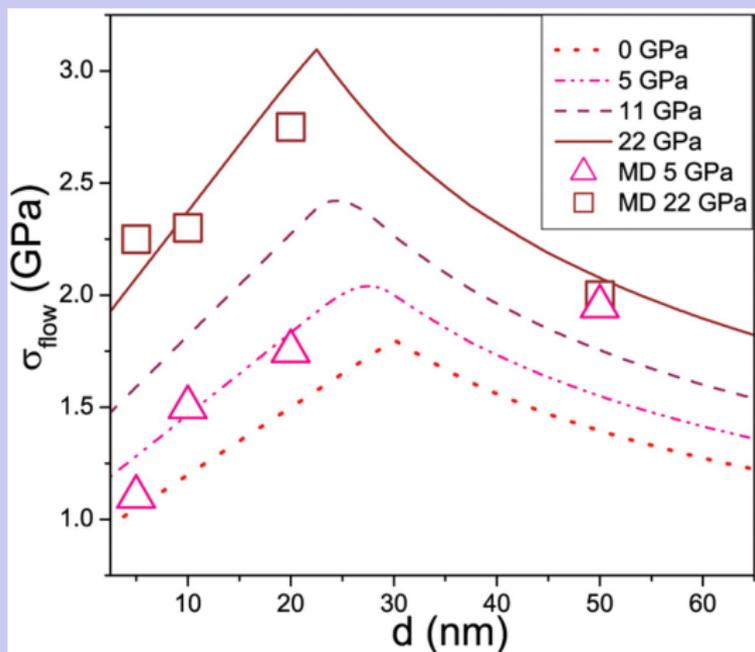
con

$$G(P) = G_0 + \beta P$$

Dislocación- plasticidad inducida por choque

- El flujo de estrés efectivo para un nanocristal puede ser tomado como el mínimo de σ_{Disl} y σ_{GBS} , aunque un modelo más realista podría incluir una mezcla de ambos cuando σ_{Disl} se aproxima a σ_{GBS} . A cualquier presión, a medida que el tamaño del grano decrece, el material se endurece de acuerdo al efecto Hall-Petch, hasta el punto donde $\sigma_{GBS} = \sigma_{Disl}$.

Mapa de dureza cualitativa



Onda de Choque

- Al aplicar la ondas de choque a una superficie del sistema, el piston, es llevado dentro a través del eje z a una velocidad constante U_p , llevando a una onda de choque con velocidad U_s .
- El estrés volumétrico ε es constante detrás de la onda de choque, es decir:

$$\varepsilon = \frac{U_p}{U_s} \quad \left(\frac{d\varepsilon}{dt} = 0 \right)$$

Onda de Choque

- La “presión” de choque es también constante detrás del frente de la onda y está dado por:

$$\sigma_{zz} = \rho_0 U_p U_s,$$

donde ρ_0 es la densidad del material prechoqueado.

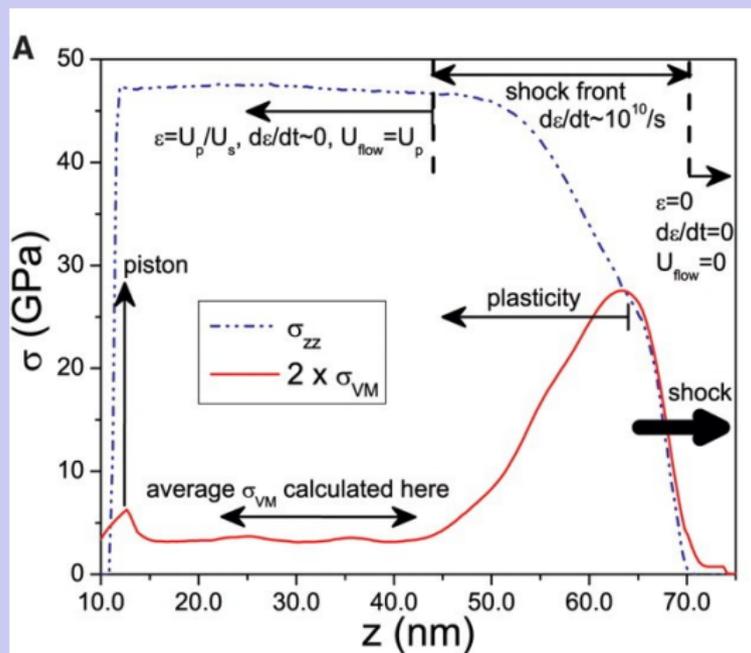
- Con u_p en el rango de 0,1 a 3 Km/s, la presión de choque para el cobre está en el rango desde 5 a 230 GPa.

Onda de Choque

- Identifican dureza y flujo de estrés con el estrés de von Mises, σ_{VM} , atrás del frente de choque, donde

$$\sigma_{VM}^2 = 0,5[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2]$$

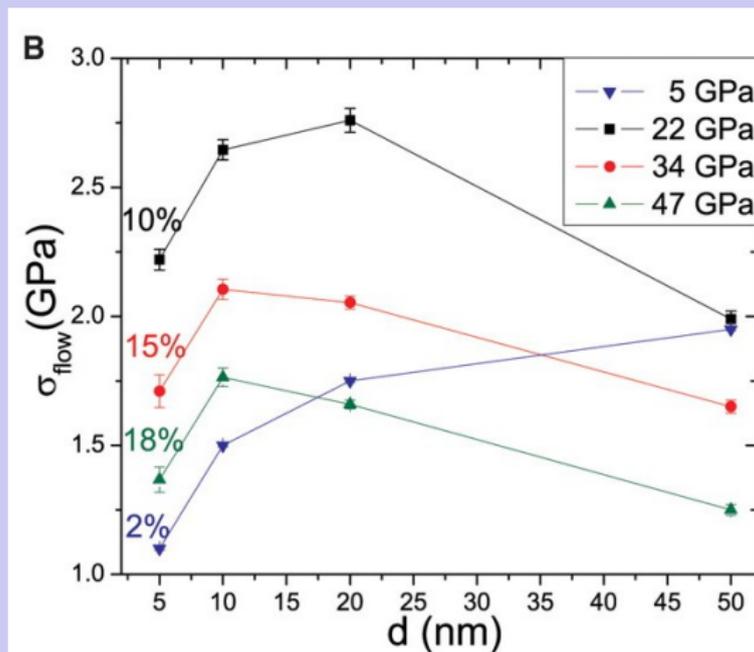
Típico perfil de choque



Simulaciones

- Simulaciones de choque a larga escala MD en muestras de cobre nanocristalinos con alrededor de 400 millones de átomos.
- Escalas de tiempo y longitud similares a experimentos de choque por láser.
- El principal resultado de este trabajo, el flujo de estrés como función del tamaño del grano y la presión, es mostrado en la siguiente figura:

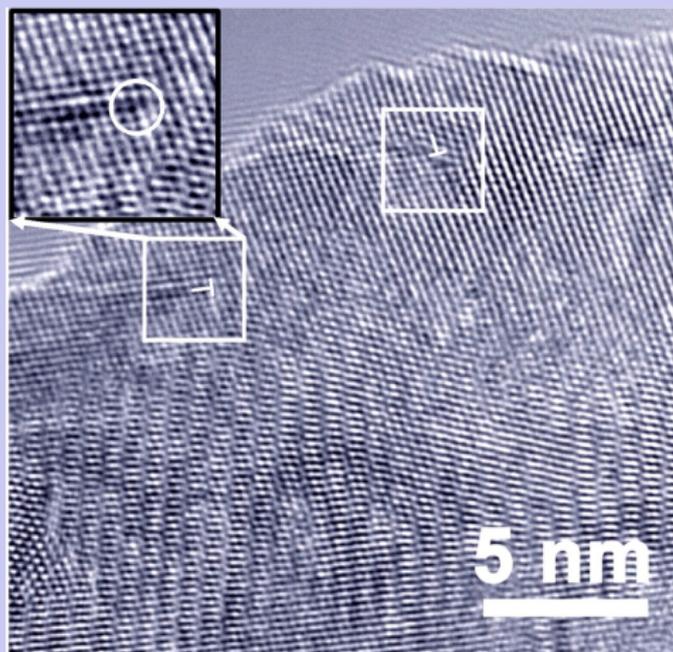
Resultado



Experimentos

- Además de las simulaciones mostradas arriba, se realizaron experimentos para entender el comportamiento de los metales nanocristalinos bajo condiciones extremas.
- Debido a las dificultades experimentales, es muy difícil de medir directamente la dinámica del proceso.
- La siguiente figura muestra una imagen de microscopía electrónica TEM (una vista plana) de níquel nanocristalino después de aplicar ondas de choque a 40 GPa, donde existe clara evidencia de la actividad de la dislocación que ocurre dentro de los granos.

Experimento



Paper

Ultrahigh Strength in Nanocrystalline Materials Under Shock Loading

Eduardo M. Bringa,^{1*} Alfredo Caro,¹ Yinmin Wang,¹ Maximo Victoria,¹ James M. McNaney,¹ Bruce A. Remington,¹ Raymond F. Smith,¹ Ben R. Torralva,¹ Helena Van Swygenhoven²

1 Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94550, USA.

2 Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen-PSI, Switzerland.

* To whom correspondence should be addressed. E-mail: ebringa@llnl.gov



Gracias.