



CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS  
DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

UNIDAD QUERETARO

## Formación de vidrios metálicos como función de la presión en $\text{Al}_3\text{Fe}$ por métodos teóricos

Tesis que presenta:

I.Q.M. Irais Valencia Jaime

Para obtener el Grado de:  
Maestro en Ciencias: Especialidad en Materiales

Directores de Tesis:

Dr. Aldo Humberto Romero Castro

Santiago de Querétaro, Qro.

Enero, 2012

ADD #	CO-197-SS1
REC'D	24-08-2012
PROJ	Don-201

ID: 199456-2001

A mi madre Clemencia Jaime, mis hermanos Luciana,  
José Soledad, María, Rocio, Luis Fernando y Juan  
David, por el apoyo incondicional que me han  
brindado.



---

## Agradecimientos

---

A mi asesor, Dr. Aldo Humberto Romero Castro por el apoyo que me brindo en la realización de esta tesis.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt), por el soporte financiero además, de la oportunidad brindada, en mi integración a la comunidad científica.

Al Dr. Tahir Cagin, por la colaboración brindada en la Universidad de Texas A&M, Collage Station (Texas, EEUU).

Al Dr. Igor Roshchin, por el apoyo en la estancia realizada en la Universidad de Texas A&M, Collage Station (Texas, EEUU).

Al proyecto TAMU-Conacyt, por el soporte financiero brindado para una estancia de investigación en Texas A&M University.

Al Dr. Chris H. Rycroft, profesor asistente en el departamento de Matemáticas en UC Berkeley y Lawrence Berkeley Laboratory, por la colaboración brindada.



---

## Índice general

---

Agradecimientos	III
Resumen	XVII
Abstract	XIX
1. Introducción y Objetivos	1
2. Dinámica Molecular	5
2.1. Ensamblés a temperatura constante	9
2.2. Ensamblés a presión constante	10
3. Vidrios Metálicos	15
3.1. Potenciales Interatómicos .	18
3.2. Caracterización Estructural	21
3.2.1. Función de distribución radial	21
3.2.2. Caracterización por "Voronoi tessellation"	22

4. Detalles computacionales	27
4.1. Temperaturas de Fusión	27
4.2. Vidrios Metálicos	29
5. Resultados y Discusión	31
5.1. Temperatura de fusión para Aluminio usando EAM	31
5.2. Temperatura de fusión para Aluminio usando EAM/FS	36
5.3. Temperatura de fusión para la aleación $Al_3Fe$	41
5.4. Vidrios metálicos	46
6. Conclusiones	57
Apendice A: Mecánica Estadística	59
.1. Postulado de igual probabilidad a priori	60
.2. Ensamble microcanónico	61
.3. Ensamble Canónico	65



---

## Índice de cuadros

---

5.1. Temperaturas de fusión para el Aluminio

41



---

## Índice de figuras

---

- 1.1. a) Esfuerzo tensil ( $\sigma_f$ ) en función del módulo de Young b) Dureza Vickers en función del módulo de Young para vidrios metálicos y aleaciones cristalinas [26]. 2
- 3.1. Diagrama Tiempo-Temperatura-Transformación muestra el comienzo de la cristalización como función del sobrenfriamiento. Por debajo de 800 K son observados dos fenómenos de cristalización, una cristalización primaria  $\otimes$  seguida por una cristalización secundaria  $\bullet$  [31]. 16
- 3.2. a) Potencial de 2 cuerpos entre los átomos  $i$  y  $j$  ( $\phi$ ) en función de la distancia entre  $i$  y  $j$  y la distancia de equilibrio b) Comportamiento de la energía de "embedding" ( $F\rho$ ) en función de la densidad de electrones relativa [6] 20
- 3.3. Ejemplo de clases de vecinos en un polígono de Voronoi [4] 24

- 5.1. a) Perfil de densidad para el sólido a NPT ( $P=0$  bar,  $T=600$  K) como función de la longitud de celda para Aluminio b) Configuración final de los átomos a NPT ( $P=0$  bar,  $T=600$  K). 32
- 5.2. a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NVT ( $T=1500$  K) como función de la longitud de celda para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NVT ( $T=1500$  K). 33
- 5.3. a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NPT ( $P=0$  bar,  $T=900$  K) como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a NPT ( $P=0$  bar,  $T=900$  K). 34
- 5.4. a) Perfil de densidad a 950 K, 1050 K, y 1100 K a NPT ( $P=0$  bar) como función de la longitud de celda para Aluminio. b) RDF a 950 K, 1050 K, y 1100 K para Aluminio. 34
- 5.5. a) Configuración final de los átomos a 950 K para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a 1050 K para Aluminio. c) Configuración final de los átomos a 1100 K para Aluminio. 35
- 5.6. La energía potencial ( $E_p$ ), Entalpía ( $H$ ) del volumen ( $V$ ) como función de la temperatura para Aluminio a NPT ( $P=0$  bar,  $T=950, 1050$  y  $1100$  K respectivamente). 36
- 5.7. a) Perfil de densidad para el sólido a NPT ( $T=600$  K,  $P=0$  bar) como función de la longitud de celda usando EAM/FS para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NPT ( $T=600$  K,  $P=0$  bar) usando EAM/FS para Aluminio 37
- 5.8. a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NVT ( $T=1500$  K) como función de la longitud de celda usando EAM/FS para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NVT ( $T=1500$  K) usando EAM/FS para Aluminio 38

- 5.9. a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NPT (T=900 K, P=0 bar) como función de la longitud de celda usando EAM/FS para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NPT (T=900 K, P=0 bar) usando EAM/FS para Aluminio 38
- 5.10. a) Perfil de densidad a 920 K, 940 K y 950 K a NPT (P=0 bar) como función de la longitud de celda para Aluminio b) RDF a 920 K, 940 K y 950 K para Aluminio 39
- 5.11. a) Configuración final de los átomos a 920 K para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a 940 K para Aluminio. c) Configuración final de los átomos a 950 K para Aluminio. 40
- 5.12. La energía potencial (Ep), Entalpía (H) y volumen (V) como función de la temperatura para Aluminio a NPT (P=0 bar, T=920, 940 y 950 K respectivamente). 40
- 5.13. a) Perfil de densidad para el sólido a NPT (T=900 K, P=0 bar) para la aleación  $Al_3Fe$  como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a (T=900 K, P=0 bar) para la aleación  $Al_3Fe$  42
- 5.14. a) Perfil de densidad para el sólido y el líquido a NVT (T=1600 K) para la aleación  $Al_3Fe$  como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a NVT (T=1600 K) para la aleación  $Al_3Fe$  42
- 5.15. a) Perfil de densidad para el sólido y el líquido a NPT (T=1100 K, P=0 bar) para la aleación  $Al_3Fe$  como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a NPT (T=1100 K, P=0 bar) para la aleación  $Al_3Fe$  43

- 5.16. a) Perfil de densidad a 1350 K, 1400 K y 1450 K a NPT(P=0 bar) como función de la longitud de celda para la aleación  $Al_3Fe$  b) RDF a 1350 K, 1400 K y 1450 K para la aleación  $Al_3Fe$  44
- 5.17. a) Configuración final de los átomos a 1350 K para la aleación  $Al_3Fe$ . b) Configuración final de los átomos a 1400 K para la aleación  $Al_3Fe$ . c) Configuración final de los átomos a 1450 K para la aleación  $Al_3Fe$ . 45
- 5.18. Energía potencial (Ep), Volumen (V) y Entalpía como función de la temperatura  $Al_3Fe$  a NPT(P=0 bar, T=1350, 1400 y 1450 K respectivamente. 45
- 5.19. Caja de simulación en 3D del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$ : a) Comenzando la sistema a 300 K b) Estado final del Vidrio Metálico. 46
- 5.20. a) Comportamiento del volumen en función de la temperatura durante el calentamiento y enfriamiento del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$  a una presión de 0 GPa. b) Comportamiento de la energía potencial en función de la temperatura durante el calentamiento y enfriamiento del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$  a una presión de 0 GPa. 47
- 5.21. Comportamiento del volumen en función de la temperatura durante el calentamiento y enfriamiento del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$  a a) 3 GPa, b) 6 GPa, c) 9 GPa y c) 12 GPa. 48
- 5.22. Temperatura de fusión como función de la presión 49
- 5.23. Temperatura de transición vítrea como función de la presión 49
- 5.24. Los PRDF parciales a 0, 6 y 12 GPa respectivamente para los pares a) Fe-Fe, b) Al-Fe y c) Al-Al. (S=Sólido 300 K, L=Líquido 2500 K y MG=Vidrio metálico) 50

5.25. Los PRDF parciales para los pares, a) Fe-Fe, b) Al-Fe y c) Al-Al a 0, 6 y 12 GPa respectivamente en el vidrio metálico.	51
5.26. Fiteo del rdf para los pares, a) Fe-Fe, b) Al-Fe y c) Al-Al a 0 GPa en el vidrio metálico.	52
5.27. Distribución de voronoi para el estado inicial a) sólido a 300 K, b) líquido a 2500 K y c) cuando se forma el vidrio metálico. Se utilizaron 864 átomos.	53
5.28. Distribución de los poliedros de Voronoi como función de a) el volumen, b) el área. Para el vidrio metálico a 0, 6 y 12 GPa.	54
5.29. Número de poliedros como función del volumen del sólido, líquido y MG a) 0GPa b) 3GPa c) 6GPa d) 9GPa e) 12GPa . .	55
1. Sistemas en equilibrio termodinámico	61
2. Subsistema en un baño térmico	65





---

## Lista de abreviaturas

---

Ab.	Descripción
RDF	Función de distribución radial
GFA	Habilidad Formadora de Vidrio
$T_g$	Temperatura de transición vítrea
$T_m$	Temperatura de fusión
$K_B$	Constante de Boltzmann
MD	Dinámica Molecular
EAM	Método del átomo embebido (Embedded Atom Method)
VP	Poliedro de Voronoi



---

## Resumen

---

Comúnmente, los metales y las aleaciones han sido conocidas por su carácter cristalino. Sin embargo, en 1960 Duwez y colaboradores descubrieron el primer sistema metálico amorfo llamado vidrio metálico. Este sistema fue sintetizado por un rápido enfriamiento del  $Au_{80}Si_{20}$  líquido. En las últimas décadas, los vidrios metálicos han sido ampliamente estudiados por métodos teóricos así como técnicas experimentales. Estos materiales han mostrado propiedades muy interesantes para la comunidad científica. Estas propiedades son alta resistencia a la corrosión, buenas propiedades magnéticas, además de buenas propiedades mecánicas. En este trabajo se realizaron cálculos para entender sistemas de vidrios metálicos a través de estudios de dinámica molecular clásica. Se investigó la aleación  $Al_3Fe$ . Efecto de la presión en las temperaturas de fusión y transición vítrea fueron investigadas. Se encontró que la temperatura de fusión muestra un comportamiento lineal como función de la presión. Finalmente, realizamos una caracterización estructural a través de función de distribución radial y estadística de Voronoi para entender el efecto de la configuración atómica en la estructura del vidrio metálico.



---

## Abstract

---

Commonly, metals and alloys have been known by their crystallinity. However, in 1960 Duwez and co-workers discovered the first metallic amorphous system called metallic glass. This system was synthesized by quenching of  $Al_{80}Si_{20}$  liquid. In the last decade, metallic glass have been widely studied by theoretical methods as well as experimental techniques. These materials have shown interesting properties for scientific community. These interesting properties are high corrosion resistance, good magnetic properties, and high mechanical properties. In this work, theoretical calculations were performed in order to understand the metallic glasses systems through molecular dynamics studies. We investigated the  $Al_3Fe$  alloy. Pressure effect in melting point temperature and glass transition were investigated. We found a linear behavior of the melting temperature as a function of pressure. Finally, we performed a structural characterization through the Radial Distribution Function and Voronoi statistical calculations in order to understand the atomic configuration effect on metallic glass structure.



# CAPÍTULO 1

---

## Introducción y Objetivos

---

Propiedades térmicas de los materiales, en especial la temperatura de fusión han sido de gran interés en el área de la ingeniería, procesamiento de materiales, entre otros. Por lo que se han realizado grandes esfuerzos en el estudio y entendimiento de este fenómeno. Estudios teóricos tales como cálculos de primeros principios, energías libres de Gibbs y líneas de coexistencia se han realizado para obtener temperaturas de fusión de múltiples metales y aleaciones.

Un vidrio metálico se caracteriza por el ordenamiento aleatorio de los átomos que lo componen, estos materiales son elaborados a partir de un líquido que es enfriado lo suficientemente rápido para suprimir su cristalinidad. A diferencia de los vidrios convencionales un vidrio metálico no es transparente en longitudes de onda del rango visible.

En el desarrollo de diferentes vidrios metálicos se han investigado diversos

sistemas encontrado propiedades muy interesantes por ejemplo, el sistema Co-Fe-Ta-B-Mo presenta un esfuerzo a la tensión de 5.2 GPa, vidrios metálicos base hierro de 4 GPa, base Ni aproximadamente 3 GPa, base Cu 2 GPa [48].

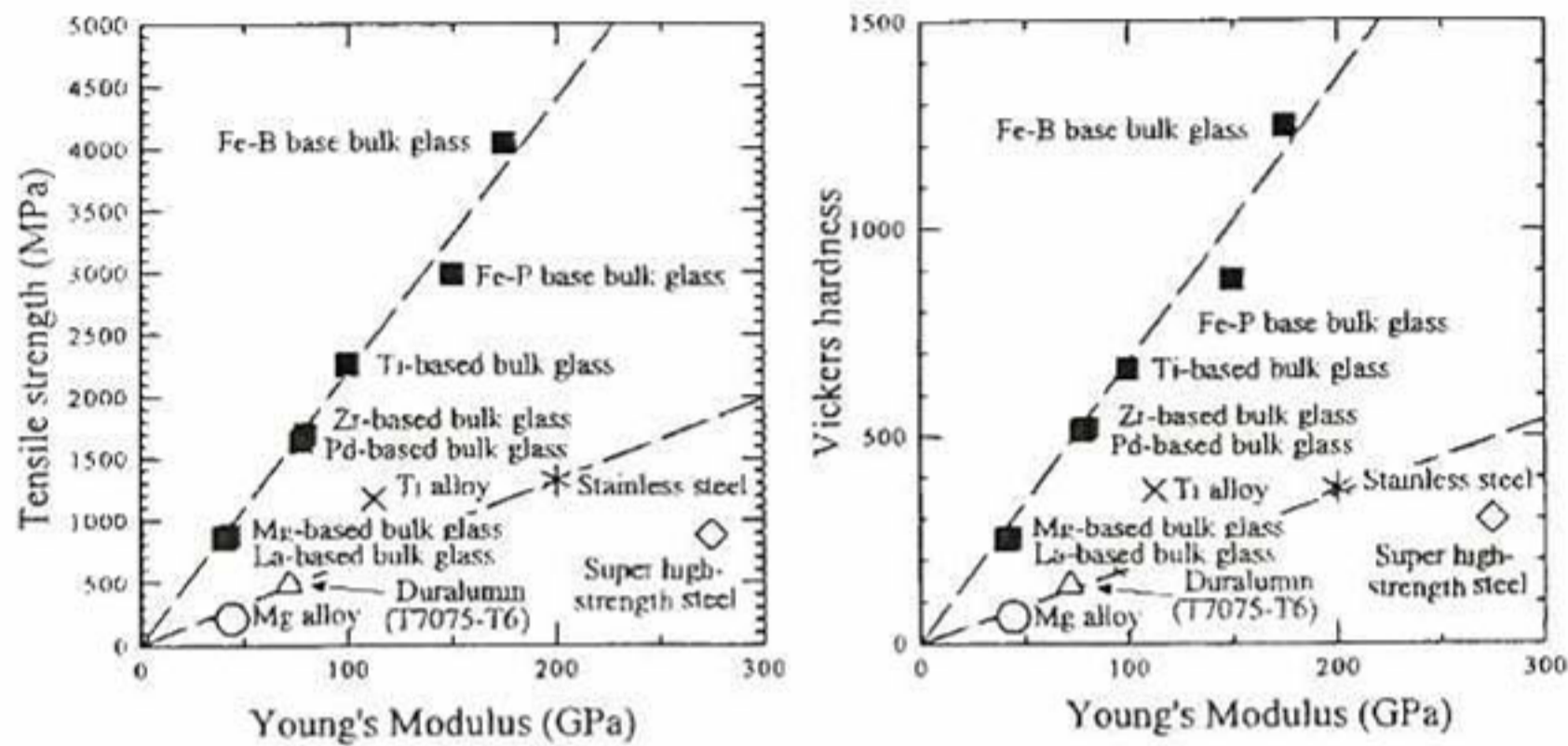


Figura 1.1: a) Esfuerzo tensil ( $\sigma_f$ ) en función del módulo de Young b) Dureza Vickers en función del módulo de Young para vidrios metálicos y aleaciones cristalinas [26].

La figura 1.1 muestra el comportamiento en el esfuerzo tensil y dureza vickers en función del módulo de Young. Se observa que las aleaciones de vidrios metálicos tienen tanto esfuerzo tensil como dureza mayores, comparados con las aleaciones cristalinas. Así pues se han planteado aplicaciones potenciales para estos materiales. Sistemas base hierro presentan buenas propiedades magnéticas, los base níquel tienen buena resistencia a la corrosión [27], otras aplicaciones que se les ha dado a estos materiales es el uso como catalizadores [18] y como separadores de celdas de combustión por su alta resistencia a la tensión. Las temperaturas de fusión se encuentran altamente relacionadas con las temperaturas de transición vítrea en vidrios metálicos, debido a que estas dos nos ayudan a predecir la capacidad formadora de vidrio (GFA por sus siglas en inglés Glass forming ability) en un



sistema mediante la relación  $T_{rg} = T_g/T_m$  [30].

## Objetivos

### OBJETIVOS GENERALES

Estudiar transiciones en vidrios metálicos mediante estudios teóricos de dinámica molecular.

### OBJETIVOS ESPECIFICOS

1. Calculo de temperatura de fusión para un sistema monoatómico y binario base aluminio.
2. Definir el potencial clásico a usar y realizar pruebas de varios parámetros estructurales para demostrar su validez tanto en sistemas monoatómicos como binarios
3. Calculo de temperaturas de transición en vidrios metálicos.
4. Caracterización estructural del vidrio metálico



## CAPÍTULO 2

---

### Dinámica Molecular

---

Una de las teorías de mayor impacto en el estudio teórico de materiales, es la dinámica molecular (MD), esta es una metodología que integra las ecuaciones de movimiento de Newton para partículas interactuantes, calcula sistemas dependientes del tiempo y puede ser aplicada a sistemas de múltiples partículas. La simulación de dinámica molecular, calcula clásicamente al equilibrio y fuera del equilibrio propiedades de transporte en sistemas de muchos cuerpos, trata los sistemas de átomos de acuerdo con las leyes de la mecánica Newtoniana.

La dinámica molecular genera información a nivel microscópico tales como velocidades y posiciones atómicas, que convirtiéndolas en observables macroscópicas se puede obtener información tales como presión, temperatura, energía, capacidad calorífica, etc. esto con ayuda de la mecánica estadística como se explica con más detalle en el Apéndice A. Para medir estos observ-

ables, debemos ser capaces de medirlos en función de la posición y momento de las partículas del sistema en estudio. Cuando se realizan simulaciones por MD lo primero que se necesita es una entrada que inicialice el sistema que se requiere. En esta se especifican parámetros y condiciones del cual parte el sistema, por ejemplo temperatura inicial, número de partículas, condiciones periódicas, tipo de átomos, posiciones iniciales, velocidades, etc. También es de gran importancia definir como los átomos interactúan entre sí. Estas interacciones son mejor conocidos como campos de fuerza o también como potenciales interatómicos, dependiendo el tipo de sistema con el que se trabaja es el potencial que se elige para modelar las interacciones entre los átomos. los potenciales interatómicos serán descritos a más detalle en 3.1. La calidad de los resultados obtenidos mediante dinámica molecular van a depender de la calidad de los potenciales que se estén usando.

La temperatura de un sistema, se define en función del teorema de equipartición, el cual establece que la energía cinética promedio por grado de libertad es:

$$\left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (2.1)$$

Sin embargo, también se puede calcular la temperatura instantánea de un sistema a partir de la energía cinética de las partículas mediante la siguiente ecuación:

$$T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_f} \quad (2.2)$$

Donde  $N_f$  es el número de grados de libertad en el sistema ( $N_f=3N-6$ ).

Simulaciones de MD son descritas esencialmente por dos ecuaciones que

son:

$$m_{i,\alpha}\ddot{r}_{i,\alpha} = f_{i,\alpha} \quad f_{i,\alpha} = -\frac{\partial}{\partial r_{i,\alpha}}\mathcal{U}(r^N) \quad (2.3)$$

Donde la primera es la ecuación de movimiento Newtoniana para una partícula  $i$  con respecto a la coordenada  $\alpha$  y la segunda es la fuerza correspondiente al potencial  $\mathcal{U}$  ( $r^N$  corresponde a  $3N$  coordenadas cartesianas del sistema para todas las partículas).

Teniendo el cálculo de las fuerzas interactuantes sobre las partículas, se realiza la integración de las ecuaciones de movimiento de Newton. Para la resolución de estas ecuaciones se han hecho uso de algoritmos matemáticos, uno de los más usados es el llamado algoritmo de Verlet. Este algoritmo parte de la expansión de una serie de Taylor de la coordenada de una partícula con respecto al tiempo como se muestra

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 + \frac{\Delta t^3}{r!}\ddot{r} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (2.4)$$

De igual manera tenemos que

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 - \frac{\Delta t^3}{r!}\ddot{r} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (2.5)$$

Sumando las ecuaciones 2.2 y 2.3

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + \frac{f(t)}{m}\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (2.6)$$

O también

$$r(t + \Delta t) \approx 2r(t) - r(t - \Delta t) + \frac{f(t)}{m} \Delta t^2 \quad (2.7)$$

Se tiene que la estimación de las nuevas posiciones van a contener un error del orden de  $\Delta t^4$ , donde  $\Delta t$  es el tiempo de paso en el esquema de dinámica molecular. Hay que hacer notar que este algoritmo no toma las velocidades para calcular las nuevas posiciones. Sin embargo, se puede calcular la velocidad a partir de una trayectoria conocida, usando las siguientes expresiones

$$r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t) = 2v(t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (2.8)$$

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (2.9)$$

MD estudia la evolución del tiempo de un sistema clásico de  $N$  partículas en un determinado volumen  $V$ . En las simulaciones la energía total es una constante de movimiento. MD utiliza distintos ensambles, ya que se pueden mantener constantes algunas propiedades variando otras. Algunos de los ensambles usados en MD son los siguientes:

- NVE también llamado ensamble microcanónico. En este ensamble se mantiene el número de partículas, el volumen y la energía constante.
- NVT también llamado ensamble canónico. En este ensamble se mantiene el número de partículas, el volumen y la temperatura constante.
- NPT también llamado isotérmico-isobárico. En este ensamble se mantiene constante el número de partículas, la presión y la temperatura constantes.

- NPH también llamado isoentálpico-isobárico. En este ensamble se mantiene constante en número de partículas, la presión y la entalpía constantes.

## 2.1. Ensamblés a temperatura constante

Cuando se realiza una simulación a temperatura constante, desde el punto de vista de la mecánica estadística lo que se pretende es imponer una determinada temperatura a un sistema, por lo que el sistema es puesto dentro de un baño de calor. En estos ensambles la probabilidad de encontrar un sistema en un estado de energía está dado por la distribución de Boltzmann. También se tiene que la distribución de velocidades para un sistema clásico está dado por la distribución de Maxwell-Boltzmann y obedece la siguiente ecuación:

$$\mathcal{P}(p) = \left( \frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp[-\beta p^2 / (2m)] \quad (2.10)$$

En simulación se han estudiado diversos métodos para controlar la temperatura de un sistema. Por ejemplo Haile y Gupta [20] sugieren que un rescalamineto en el momento, en el cual las velocidades de las partículas son escaladas a cada tiempo para mantener la energía cinética total constante, aquí se integra la fuerza de cada partícula

$$\dot{\mathbf{p}}_i = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (2.11)$$

Donde  $\mathbf{p}$  es el momento y  $\mathbf{q}$  es la coordenada. El momento  $\mathbf{p}$  es escalado de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m} (2m\Lambda / \sum \mathbf{p}_i^2) \quad \Lambda = \frac{m}{2} \sum \dot{\mathbf{q}}_i^2 \quad (2.12)$$

esto con la finalidad de obtener las velocidades y posiciones. Andersen [1] propone un método por el cual las partículas cambian sus velocidades por colisiones estocásticas, donde cada colisión estocástica es un evento instantáneo que afecta el momento de una partícula. Nosé [40][21] incluye un grado de libertad adicional ( $s$ ) el cual actúa como un sistema externo para el sistema físico de  $N$  partículas. Por lo que el Hamiltoniano usado es:

$$H = \sum_i \mathbf{p}_i^2 / 2m_i s^2 + \mathcal{U}(\mathbf{q}_i) + p_s^2 / 2Q + gkTIns \quad (2.13)$$

Donde  $p_s$  es un momento conjugado de  $s$ ,  $Q$  es un parámetro de dimensión (energía  $tiempo^2$ ),  $k$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es una temperatura externa,  $g$  es un parámetro para los grados de libertad de un sistema físico. Este formalismo puede ser aplicado a las ecuaciones de movimiento

$$\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i s^2} \quad (2.14)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i} = -\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (2.15)$$

$$\frac{dp_s}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial s} = (\sum_i \mathbf{p}_i^2 / m_i s^2 - gkT) / s \quad (2.16)$$

## 2.2. Ensamblés a presión constante

En simulaciones a presión constante el volumen es considerado como una variable dinámica que cambia a lo largo de la simulación. Por esto Martyna



*et al.* [34] proponen ecuaciones de posición y momento:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{p_\epsilon}{W} \mathbf{r}_i \\ \dot{\mathbf{p}} &= \mathbf{F}_i - \left(1 + \frac{d}{dN}\right) \frac{p_\epsilon}{W} \mathbf{p}_i - \frac{p_{\zeta_1}}{Q_1} \mathbf{p}_i\end{aligned}\quad (2.17)$$

En la ecuación 2.17 se introduce un termostato, con las variables  $\zeta_1$ ,  $p_{\zeta_1}$  y  $Q_1$ . También se observa la adición de un borostato con las variables  $\epsilon$ ,  $p_\epsilon$  y  $W$ , donde  $\epsilon$  es un logaritmo del volumen del sistema.

$$\epsilon = \ln(V/V(0)) \quad (2.18)$$

Donde  $V(0)$  es el volumen a  $t = 0$ ,  $W$  es el parámetro de masa asociado a  $\epsilon$  y  $p_\epsilon$  es el momento conjugado a  $\epsilon$ , estas ecuaciones pueden ser complementadas con ecuaciones de movimiento para el volumen

$$\begin{aligned}\dot{V} &= \frac{dV p_\epsilon}{W} \\ \dot{p}_\epsilon &= dV(P_{int} - P_{ext}) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - \frac{p_{\zeta_1}}{Q_1} p_\epsilon\end{aligned}\quad (2.19)$$

Donde  $P_{ext}$  es la presión externa, esta presión es impuesta como lo es la temperatura,  $P_{int}$  es la presión interna del sistema, la cual puede ser calculada a lo largo de la simulación con la siguiente ecuación

$$P_{int} = \frac{1}{N} \left[ \sum_{i=1}^N \left( \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right) - dV \frac{\partial U(V)}{\partial V} \right] \quad (2.20)$$

Donde  $U$  es el potencial [15]. Andersen [1] propone para un ensamble NPH remplazar las coordenadas  $\mathbf{r}_i$ ,  $i=1, \dots, N$ , de los átomos por coordenadas escaladas  $\rho_i = \mathbf{r}_i/V^{1/3}$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , donde las ecuaciones de movimiento resultantes son:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}_i}{m} + \frac{1}{3}\mathbf{r}_i \frac{d \ln V}{dt} \quad (2.21)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = - \sum_{j \neq i=1}^N \hat{r}_{ij} - \frac{1}{3}\mathbf{p}_i \frac{d \ln V}{dt} \quad (2.22)$$

$$\frac{M d^2 V}{dt^2} = -\alpha + \left( \frac{2}{3} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{2m} - \frac{1}{3} \sum_{i < j=1}^N r_{ij} u'(r_{ij}) \right) / V \quad (2.23)$$

Para un ensamble NPT Andersen introduce colisiones estocásticas dentro de una presión constante. Parte de las ecuaciones Hamiltonianas de movimiento

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \frac{\pi_i}{mQ^{2/3}} \quad \pi_i = \frac{mQ^{2/3}}{\dot{\rho}_i} \quad (2.24)$$

$$\frac{d\pi_i}{dt} = -Q^{1/3} \sum_{i < j=1}^N \frac{\rho_{ij} u'(Q^{1/3} |\rho_{ij}|)}{|\rho_{ij}|} \quad (2.25)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{P_i}{M} \quad (2.26)$$

$$\frac{d\Pi}{dt} = -(3Q)^1 (-2(2mQ^{2/3})^{-1} \sum_{i=1}^N \pi_i \cdot \pi_i + Q^{1/3} \sum_{i < j} \rho_{ij} u'(Q^{1/3} \rho_{ij}) + 3\alpha Q) \quad (2.27)$$

Estas ecuaciones de movimiento para el sistema escalado pueden ser resueltas numéricamente para dar las coordenadas y momento como función del

tiempo. Nosé [40] propone un ensamble TP combinando el método de presión constante de Andersen [1] el cual propone un rescalaminto de coordenadas dado por  $V^{1/3}$  y un rescalamiento del tiempo dado por  $s$  de tal forma que el hamiltoniano resultante es:

$$H = \sum_i \mathbf{p}_i^2 / 2m_i V^{2/3} s^2 + \mathcal{U}(V^{1/3} \mathbf{q}) + p_s^2 / 2Q + gkTIns + p^2 v / 2W + P_{ex} V \quad (2.28)$$

Donde  $p_v$  es el momento conjugado de  $V$ ,  $W$  es la masa para el momento de volumen y  $P_{ex}$  es la presión externa. Ahora las ecuaciones de movimiento son:

$$\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} = \mathbf{p}_i / m_i V^{2/3} s^2 \quad (2.29)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = - \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \mathbf{q}_i} V^{1/3} \quad (2.30)$$

$$\frac{ds}{dt} = \frac{p_s}{Q} \quad (2.31)$$

$$\frac{dp_s}{dt} = \left[ \sum_i (\mathbf{p}_i^2 / m_i V^{2/3} s^2 - gkT) \right] / s \quad (2.32)$$

$$\frac{dV}{dt} = \frac{p_v}{W} \quad (2.33)$$

$$\frac{dp_v}{dt} = \left[ \sum_i (\mathbf{p}_i^2 / m_i V^{2/3} s^2 - \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \mathbf{q}_i} \mathbf{q}_i) \right] / 3V - P_{ex} \quad (2.34)$$



## CAPÍTULO 3

---

### Vidrios Metálicos

---

Un vidrio metálico surge a partir de un líquido que es enfriado lo suficientemente rápido para evitar la cristalización. Para vidrios metálicos las velocidades de enfriamiento críticas son usualmente altas [18], se ha encontrado teóricamente que para el aluminio la velocidad de enfriamiento es alrededor de  $4,2 \times 10^{13} K/s$  [7]. El estado de vidrio es alcanzado cuando un líquido enfriado solidifica sin cristalización lo cual es asociado con el fenómeno de transición de vidrio que a su vez está relacionado con la habilidad formadora de vidrio (GFA equivalente a Glass-Forming Ability), que mide la velocidad crítica de enfriamiento por encima de la cual no ocurre la cristalización durante la solidificación. La GFA está dada por la relación  $T_g/T_l$  donde  $T_g$  es la temperatura de transición de vidrio y  $T_l$  es la temperatura del líquido. Los vidrios metálicos ofrecen atractivos beneficios combinando algunas propiedades deseables de metales cristalinos y la forma convencional de vidrios base óxido

[17]. Los procesos de formación de un vidrio son altamente influenciados por la evolución de la cinética de las fases termodinámicamente estables. Los rangos de composición donde los vidrios se forman tienen condiciones que son controladas por la competencia de posibles fases para cristalizar incluyendo no solo las soluciones sólidas sino también las fases intermedias estables o metaestables. Incrementando la eficiencia atómica decrece el volumen libre lo cual hace que se reduzca la movilidad atómica la cual conlleva a la cristalización. Como lo mencionamos anteriormente la formación de vidrio requiere la estabilización de la estructura amorfa y la supresión de la cristalización: para aleaciones de multicomponentes de átomos de diferentes tamaños con una estructura densa son energéticamente favorables. La formación de vidrio vía supresión de cristalización puede ser lograda de dos formas: una es para evitar por completo la nucleación, la otra es la supresión de crecimiento del cristal [33].

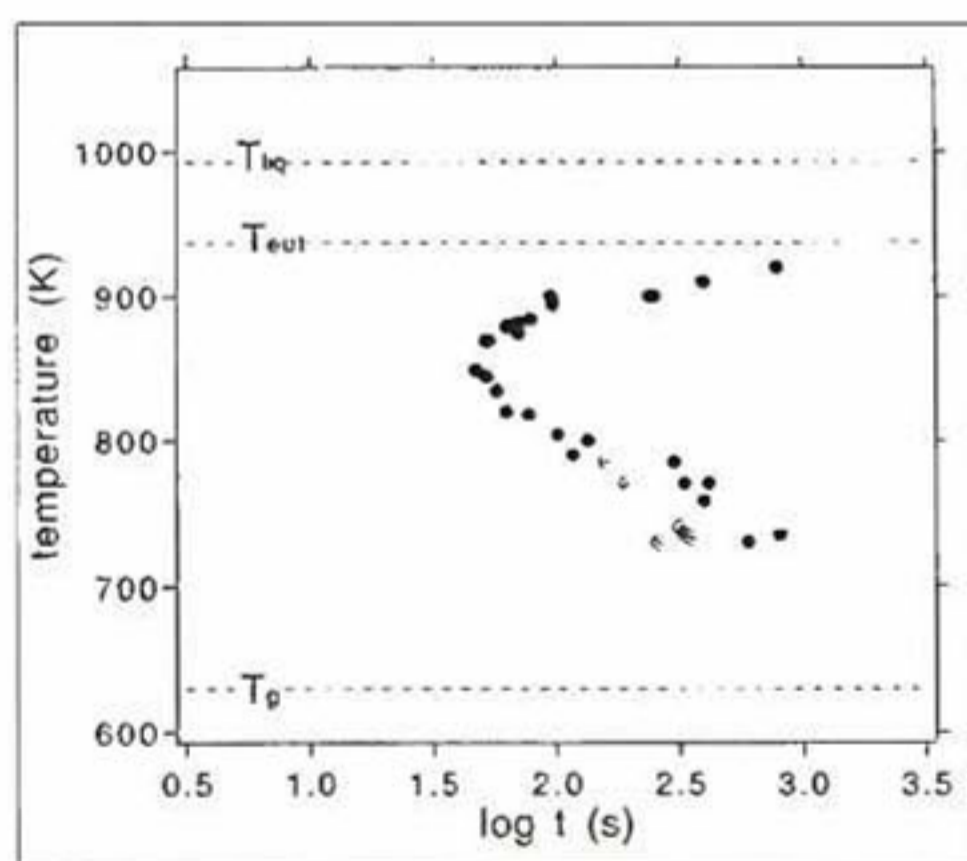


Figura 3.1: Diagrama Tiempo-Temperatura-Transformación muestra el comienzo de la cristalización como función del sobrefriamiento. Por debajo de 800 K son observados dos fenómenos de cristalización, una cristalización primaria  $\otimes$  seguida por una cristalización secundaria  $\bullet$  [31].

La figura muestra un diagrama (TTT) tiempo-temperatura-transformación

para un líquido superenfriado de  $Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$ , esta figura muestra todos los tiempos de medición para el inicio de la cristalización a diferentes temperaturas. En la figura se aprecia la típica forma "C" a 51 s y 850 K, muestra que la velocidad de enfriamiento crítica para evitar la forma "C" (cristalización) en este sistema es de  $1.8K/s$ , además indica que por encima de 800 K la fase metaestable del líquido sobreenfriado está dominada por un evento de cristalización, mientras que por debajo de 800 K es observada una cristalización primaria y secundaria. Estos diagramas indican también el incremento de la fuerza de arrastre para la cristalización, además del decremento de la movilidad atómica en el super enfriamiento[31]. Si se separan las contribuciones cinéticas y termodinámicas para la GFA encontramos que los vidrios metálicos muestran alta viscosidad y baja fuerza de arrastre para la cristalización [5].

En el desarrollo de diferentes vidrios metálicos se han investigado diversos sistemas base Zr[47], base Fe[8], base Al y base Fe[43], base Cu[45][36], encontrado propiedades muy interesantes por ejemplo, el sistema  $Co - Fe - Ta - B - Mo$  presenta un esfuerzo a la tensión de  $5.2GPa$ , vidrios metálicos base hierro de  $4GPa$ , base Ni aproximadamente  $3GPa$ , base Cu  $2GPa$  [48]. Así pues se han planteado aplicaciones potenciales para estos materiales. Sistemas base hierro presentan buenas propiedades magnéticas, los base níquel tienen buena resistencia a la corrosión [27], otras aplicaciones que se les ha dado a estos materiales es el uso como catalizadores [18] y como separadores de celdas de combustión por su alta resistencia a la tensión.

### 3.1. Potenciales Interatomicos

En dinámica molecular las fuerzas interactuantes entre los átomos son representadas por medio de funciones de potencial también llamados potenciales empíricos, con diferentes parámetros, los cuales pueden ser fitcados para datos experimentales o calculados. Se han estudiado potenciales interatomicos para dos, tres y muchos cuerpos. Para 2 cuerpos el más conocido es el Lennard-Jonnes, el cual calcula las fuerzas de Van der Waals y la forma funcional es:

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.1)$$

Para potenciales de muchos cuerpos la energía potencial no puede ser encontrada por medio de la interacción entre pares de átomos, aquí la interacción entre partículas son calculadas por la combinación de terminos de alto orden.

El desarrollo de potenciales empíricos para muchos cuerpos en los ultimos años han recibido un gran impulso en el área de ciencia de materiales principalmente por sus importantes aplicaciones en el diseño de materiales a condiciones dadas. Los potenciales interatómicos han sido usados en la modelación de propiedades mecánicas y termodinámicas en metales y sus aleaciones. Muchos potenciales han sido propuestos en la literatura; por ejemplo el Embedded Atom Method (EAM) de Daw y Baskes [11], el Finnis Sinclair (FS) [13], el Rosato-Guillope-Legrand (RGL) [10], el Second-Moment Approximation del Tight-Binding (TB-SMA). En términos generales, estos potenciales son capaces de reproducir propiedades estructurales y dinámicas tales como parámetro de red, energía cohesiva, constantes elásticas y fonones.



El embedded atom method (EAM) fue desarrollado por Daw y Baskes, este potencial es basado en la teoría del cuasi-átomo [44], el cual permite el tratamiento de sistemas metálicos, impurezas, superficies, aleaciones, entre otros. El EAM toma a los átomos como impurezas en un sólido, debido a que la energía de una impureza es un funcional de la densidad de electrones y la energía cohesiva puede calcularse a partir de la energía de "embedding". Hohenberg y Kohn muestran que la densidad de electrones únicamente especifica el potencial, además que la energía es una funcional de la densidad [11]. Cuando se toma a los átomos como una impureza la energía total puede ser obtenida a partir del concepto de cuasi-átomo y es dada como sigue:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) \quad (3.2)$$

Donde  $F_i$  es la energía de "embedding",  $\rho_{h,i}$  es la densidad del "host" a la posición  $R_i$  pero sin átomo  $i$  y la energía total es la suma de las contribuciones individuales. También se hace una corrección para repulsión núcleo-núcleo y se asume que esta toma la forma de un par repulsivo a corto alcance entre los núcleos, por lo que la energía total resultante es dada por la ecuación

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (3.3)$$

$$\rho_{h,i} = \sum_{j(\neq i)} f_j(R_{ij})$$

Donde  $E_{tot}$  es la energía interna total,  $\rho_{h,i}$  es la densidad de electrones al átomo  $i$ ,  $f_j$  es una función para la densidad de electrones del átomo  $j$  como función de la distancia,  $R_{ij}$  es la distancia entre  $i$  y  $j$ ,  $F_i(\rho_{h,i})$  es la energía de "embedding" para el átomo  $i$  en una densidad de electrones  $\rho_{h,i}$  y

$\phi_{ij}$  es el potencial central en 2 cuerpos entre los átomos  $i$  y  $j$ . Las funciones correspondientes a  $F_i(\rho_{h,i})$ ,  $\phi_{ij}$ , y  $f_i$  pueden adquirir diferentes formas por ejemplo Baskes y Daw [11], Johnson [29], Foiles, Baskes y Daw [14], J.Cai y Y. Y. Ye [6] dan buen detalle de estas funciones. Las variables  $f$  y  $F$  deben ser especificadas para cada especie atómica y  $\phi$  para cada posible combinación [11],[29]. A partir de la ecuación 3.3 pueden ser calculadas propiedades tales como parámetro de red, constantes elásticas, energía de formación de vacancia, energía de sublimación, modulo volumétrico.

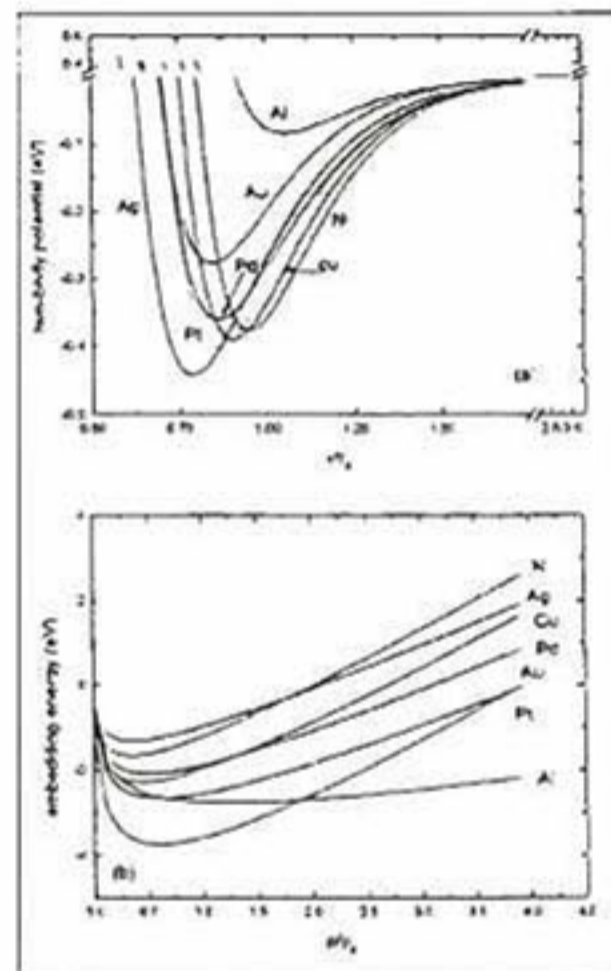


Figura 3.2: a) Potencial de 2 cuerpos entre los átomos  $i$  y  $j$  ( $\phi$ ) en función de la distancia entre  $i$  y  $j$  y la distancia de equilibrio b) Comportamiento de la energía de "embedding" ( $F\rho$ ) en función de la densidad de electrones relativa [6]

La figura obtenida por Cai y Ye muestra las funciones resultantes para  $F(\rho)$  y  $\phi(r)$  de Ni, Ag, Cu, Pd, Au, Pt y Al [6]. Cleri y Rosato sugieren que las propiedades cohesivas de los metales de transición son originadas desde la banda  $d$  de la densidad de estados. Ellos muestran la energía cohesiva de la siguiente forma:

$$E_i = \sum_i (E_R^i + E_B^i) \quad (3.4)$$

Donde  $E_R^i$  es el la interacción del par repulsivo que toma la forma de Born-Mayer y  $E_B^i$  es el "tight-binding" de la banda de energía  $d$  para metales de transición aproximados por el segundo momento. Estas dos energías están dadas por las siguientes ecuaciones

$$E_B^i = - \left[ \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 e^{-2q_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta} - 1)} \right]^{1/2} \quad (3.5)$$

$$E_R^i = \sum_j A_{\alpha\beta} e^{-p_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta} - 1)} \quad (3.6)$$

Donde  $r_{ij}$  es la distancia entre los átomos  $i$  y  $j$ ,  $r_0^{\alpha\beta}$  es la distancia del primer vecino,  $\xi$ ,  $q$ ,  $A$  y  $p$  son parámetros ajustables al potencial [10].

Dinámica molecular describe a los átomos como partículas interactuando a través de un potencial interatómico, que describe su energía como función de la posición en relación a todos los átomos vecinos en una región del espacio [42].

## 3.2. Caracterización Estructural

### 3.2.1. Función de distribución radial

La función de distribución radial (RDF) ha sido ampliamente usada para describir sistemas líquidos y amorfos, esta es una función de correlación entre pares. Describe como los átomos se organizan unos alrededor de otros en una estructura local y representa la probabilidad de encontrar un par de átomos

como función de una distancia  $r$  a partir de un átomo central. El RDF puede ser definido de la siguiente forma:

$$g_{\alpha\beta}(r) = \frac{N}{4\pi r^2 \rho N_\alpha N_\beta} \sum_{i=1}^{N_\alpha} \sum_{j=1}^{N_\beta} \delta(r - |\bar{r}_{ij}|) \quad (3.7)$$

Donde  $\rho$  es la densidad en el sistema de  $N$  átomos,  $N_\alpha$  y  $N_\beta$  son el número de átomos del tipo  $\alpha$  y  $\beta$  respectivamente,  $|\bar{r}_{ij}|$  es la distancia entre los dos átomos  $i$  y  $j$  [9] [46].

### 3.2.2. Caracterización por “Voronoi tessellation”

En vidrios metálicos los átomos tienden a organizarse entre ellos, tal que maximizen la densidad de empaquetamiento local. El ambiente local de un átomo puede ser tratado en términos de la geometría de la capa formada por los átomos de vecinos cercanos referidos a la primera capa de coordinación [3]. El método de “Voronoi tessellation” se usa para caracterizar el ambiente atómico así como el orden topológico a corto y mediano alcance. El Poliedro de Voronoi (VP) es un análogo a la celda de Wigner-Seitz sólo que el VP es usado en sistemas desordenados, mientras que la celda de Wigner-Seitz es usada para cristales. Un VP en 3-D es un poliedro convexo formado de planos perpendiculares entre vectores del centro a sus medios puntos [16].

Para mejor entendimiento del VP se describirá la construcción del mismo, primero consideremos un conjunto de centros  $P_1, P_2, \dots, P_n$  en  $L$  dimensiones en un espacio euclidiano  $E$ . El VP  $V_i$  alrededor de un centro  $P_i$  dado es el conjunto de puntos más cercano a  $P_i$  que aun  $P_j$

$$V_i = \{x \in E : d(x, P_i) \leq d(x, P_j), j = 1, 2, \dots, n\} \quad (3.8)$$

Donde  $d$  denota distancia. Los poliedros son intersecciones de la mitad del espacio. El conjunto de VP correspondientes a una configuración dada de centros es llamada diagrama de Voronoi. Dado un centro  $P_i$  y su vecino  $P_j$  la línea  $P_iP_j$  es cortada perpendicularmente a su medio punto  $y_{ij}$  por el plano  $h_{ij}$ . En este caso se llama  $H_{ij}$  al medio espacio generado por  $h_{ij}$  que consiste en un subconjunto de  $E$  en el mismo lado de  $h_{ij}$  como  $P_i$

$$V_i = \cap_j H_{ij} \quad (3.9)$$

$V_i$  está limitada por las caras, con cada cara  $f_{ij}$  pertenecientes a distintos planos  $h_{ij}$ . Es pertinente distinguir los tipos de vecinos de  $P_i$

1. Vecinos directos: Si  $y_{ij}$  pertenece a  $V_i$ , entonces,  $P_j$  es un vecino directo.
2. Vecinos indirectos: Si un subconjunto de  $h_{ij}$  es una cara de  $V_i$  pero  $y_{ij}$  no pertenece a  $v_i$ , entonces,  $P_j$  es un vecino indirecto.
3. Vecinos degenerados: Si la intersección de  $h_{ij}$  y  $V_i$  es justo un vertice o un eje entonces,  $P_j$  es un vecino degenerado.
4. Vecinos Cuasi-directos: Si  $P_j$  es un vecino directo o si  $P_j$  sería un vecino directo en ausencia de todos los vecinos indirectos entonces, es un vecino cuasi-directo de  $P_i$

La figura 3.3 muestra las clases de vecinos en un VP en 2-D. Observamos que los vecinos cuasi-directos generan un poliedro directo  $D$ . Por lo que se puede decir que  $V_i \subset D_i$  para cada  $i$ . Para la construcción del VP se comienza construyendo el poliedro  $D$ , a continuación se procede a  $V$ . Dado un centro  $P_i$  y su poliedro directo en el limite  $D_i$  se puede circunscribir una esfera de diámetro  $d_i$  alrededor de  $D_i$ . Entonces si un punto que este más lejos que  $d_i$  desde  $P_i$  no podra ser un vecino, esto será un criterio para eliminar candidatos

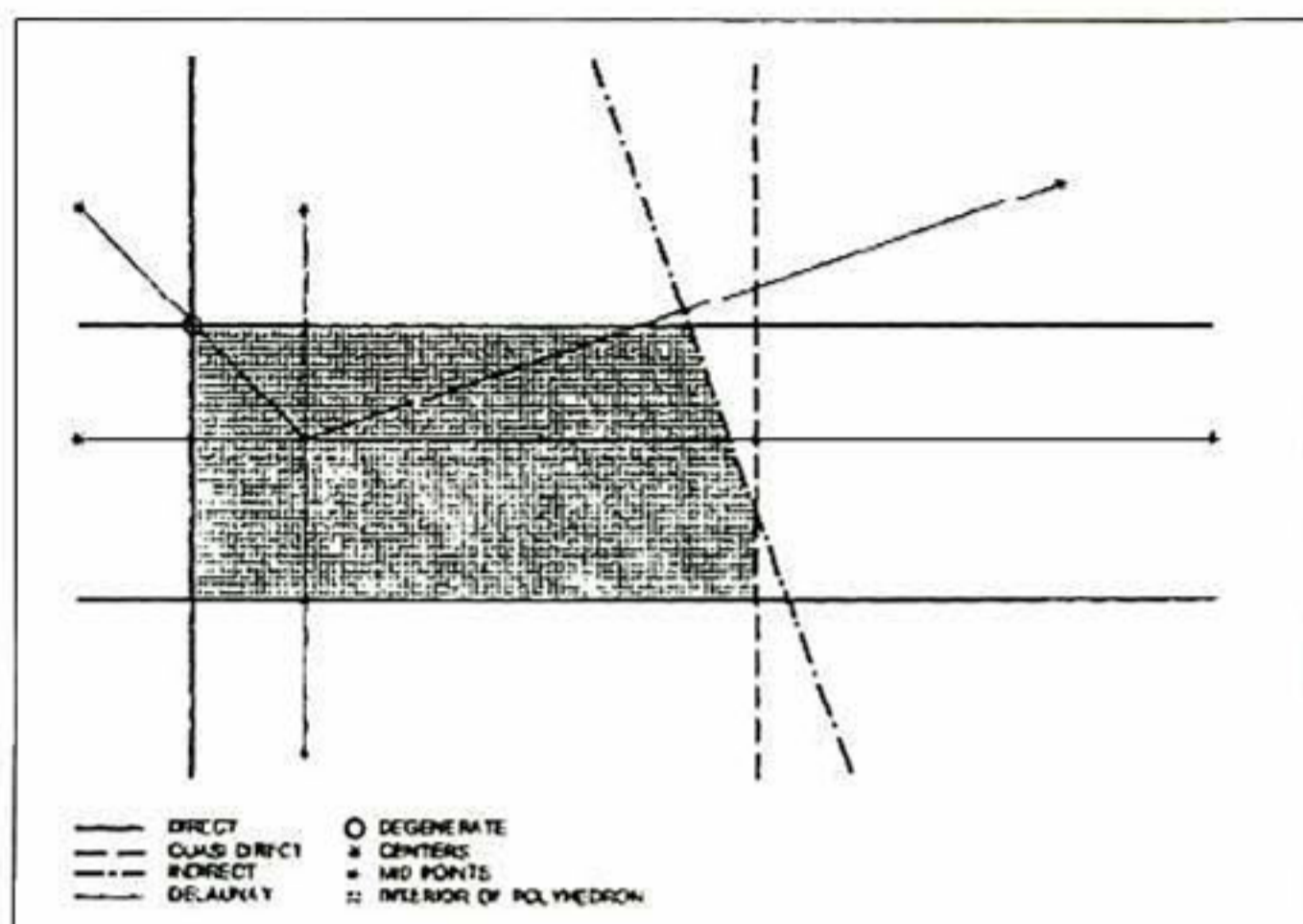


Figura 3.3: Ejemplo de clases de vecinos en un polígono de Voronoi [4]

a vecinos indirectos. Los vecinos que no son eliminados sirven para obtener  $V_i$  desde  $D_i$ ; vértices, ejes y algunas caras completas son cortadas por un plano generado por vecinos indirectos. Estudios de modelos aleatorios indican que el número promedio de ejes por cara es aproximadamente 5. En la construcción de  $D_i$  y  $V_i$  se encuentran primero las caras, después los ejes y finalmente los vértices [4]. Se pueden definir índices de Voronoi para asignar los diferentes tipos de coordinación del poliedro (CP) alrededor de un átomo central, estos índices están dados por  $(n_3, n_4, n_5, n_6, \dots)$  donde  $n_m$  denota el número de vértices en la CP con un número de ejes igual a  $m$ . Los índices del vértice  $v_m$  son arbitrarios pero tienen 2 restricciones. Una es, que el total del número de vértices en un poliedro de coordinación es igual al número de coordinación del átomo central

$$\sum_m v_m = Z \quad (3.10)$$

La segunda, un poliedro de Voronoi para algún átomo podría satisfacer

la relación de Euler

$$\sum_m = (6 - m)v_m = 0 \quad (3.11)$$

Donde se toma en cuenta que el vértice la CP  $m$  es igual a el número de ejes por cara de Voronoi entre este vértice y el átomo central.





## CAPÍTULO 4

---

### Detalles computacionales

---

#### 4.1. Temperaturas de Fusión

Se realizaron cálculos para encontrar la temperatura de fusión del Aluminio y de  $Al_3Fe$ . La simulación fue realizada para 1000 átomos con condiciones periódicas en  $xyz$ , se usó Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [22] que es un código basado en dinámica molecular clásica. Este código modela ensambles de partículas en estado líquido, sólido o gaseoso. Puede modelar sistemas tales como atómicos, poliméricos, biológicos, metálicos y sistemas de grano grueso con una gran variedad de campos de fuerza y condiciones frontera.

Para el Aluminio se utilizaron dos tipos de potenciales, uno definido por Daw y Baskes [11] y el otro fue desarrollado por Mendeleev *et. al.* [38]. Se tomó como referencia para los dos casos una celda fcc con parámetro de red

de 4.05 Å [32].

También se calculo la temperatura de fusión para una aleación de Fe-Al. para esta aleación se tomo la fase  $FeAl_3$ , aquí partimos de una estructura  $L1_2$  con parámetro de red de 3.7856 Å desarrollado por Mendeleev *et. al.* [37].

El calculo de temperaturas de fusión se llevo acabo fundamentalmente en cuatro etapas las cuales se describen a continuación

1. En la primera etapa se construyo una supercelda de  $5 \times 5 \times 10$  (1000 átomos), la simulación fue llevada a cabo a un número de partículas, presión y temperatura constantes (NPT). La temperatura a la que se llevo a cabo la simulación fue por debajo del punto de fusión en este caso a 600 K para Aluminio y 900 para la aleación de Fe-Al, en los tres casos la presión fue de 0 bar, el objetivo de esta etapa es simular el sistema sólido.
2. En la segunda etapa la mitad de los átomos se mantuvieron fijos, es decir el sistema se dividió en dos partes tomando el eje Z, tal que la mitad de los átomos en la supercelda que se encuentran en la mitad menor de la caja en dirección Z se encuentran fijos (fuerza y velocidad cero), mientras que los otros se encuentran móviles. Los átomos que se encuentran móviles se someten a una simulación en la cual el número de partículas, volumen y temperatura permanecen constantes (NVT); la temperatura de esta simulación será mayor a la esperada de fusión por lo que se obtendra una fase líquida. Al final de ésta etapa tendremos sólido y líquido en una misma caja, lo que sigue es equilibrarlos.
3. En la tercer etapa se realizo una simulación a una número de partículas, presión y temperatura constantes (NPT), en esta simulación se pretende equilibrar la fase sólida y líquida por lo cual los átomos es-

tarán libres para moverse por lo que se requieren pocas iteraciones. Esta etapa parte de la última configuración de la etapa anterior, solo se toman las posiciones de los átomos no sus velocidades dado, que las velocidades se generaran de acuerdo a la distribución de Maxwell a la temperatura que se desea.

4. En la etapa 4 se busca lo que es la co-existencia de la fase sólida y líquida, lo cual se puede hacer de dos formas una es a un número de partículas, presión y temperatura constantes (NPT) y la otra es a número de partículas, presión y entalpía constantes (NPH). En el NPT la temperatura promedio esta fijada a un valor deseado por lo que si la temperatura en la simulación estará por encima o por debajo de la temperatura de fusión del sistema: si se encuentra por debajo el sólido prevalecerá ya que el líquido irá desapareciendo mientras que si se encuentra por encima el líquido prevalecerá y el sólido desaparecerá. Para el cálculo a NPH la temperatura promedio no se encuentra definida por lo que si la temperatura inicial del sistema es inferior a la de coexistencia el sólido será más estable por lo que la energía potencial disminuirá y la energía cinética aumentará por el contrario si la temperatura inicial es superior a la de co-existencia el líquido será más estable por lo que la energía potencial aumenta y la energía cinética disminuye.

## 4.2. Vidrios Metálicos

En este trabajo se estudio la formación de vidrio metálico del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$ , la simulación fue realizada para 13500 átomos con condiciones periódicas en xyz, se uso Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [22]. Se partio de la fase  $FeAl_3$ , con una estructura

$L1_2$  de parámetro de red de 3.7856 Å [37].

La simulación fue realizada de la siguiente forma:

1. Primero, la aleación fue calentada de 300 a 2500 K a una velocidad de  $2,75 \times 10^{12} K/s$ .
2. Se equilibro el líquido durante 200 ps. después el sistema se enfrió a una velocidad de  $5,5 \times 10^{13} K/s$ .
3. El sistema fue equilibrado 200 ps.
4. La simulación fue llevada a cabo a Número de partículas, Presión y Temperatura constantes (NPT).

## CAPÍTULO 5

---

### Resultados y Discusión

---

#### 5.1. Temperatura de fusión para Aluminio usando EAM

En la etapa 1, se obtuvo el perfil de densidad así como la configuración de los átomos para el sistema sólido del cual se partirá para obtener la fase líquida. La figura 5.1 muestra la densidad de átomos como función del largo de la caja de simulación. Podemos apreciar en la figura 5.1(a) que la densidad de átomos se encuentra entre 25 y 30. La configuración final de los átomos puede ser analizada en la figura 5.1(b) donde se observa que los átomos se encuentran completamente ordenados, lo cual sugiere la presencia de una fase cristalina.

El objetivo de la etapa 2 es obtener la fase líquida, por lo cual se trabajó solo con la mitad de átomos (500 átomos) como se describió en 4.1. La

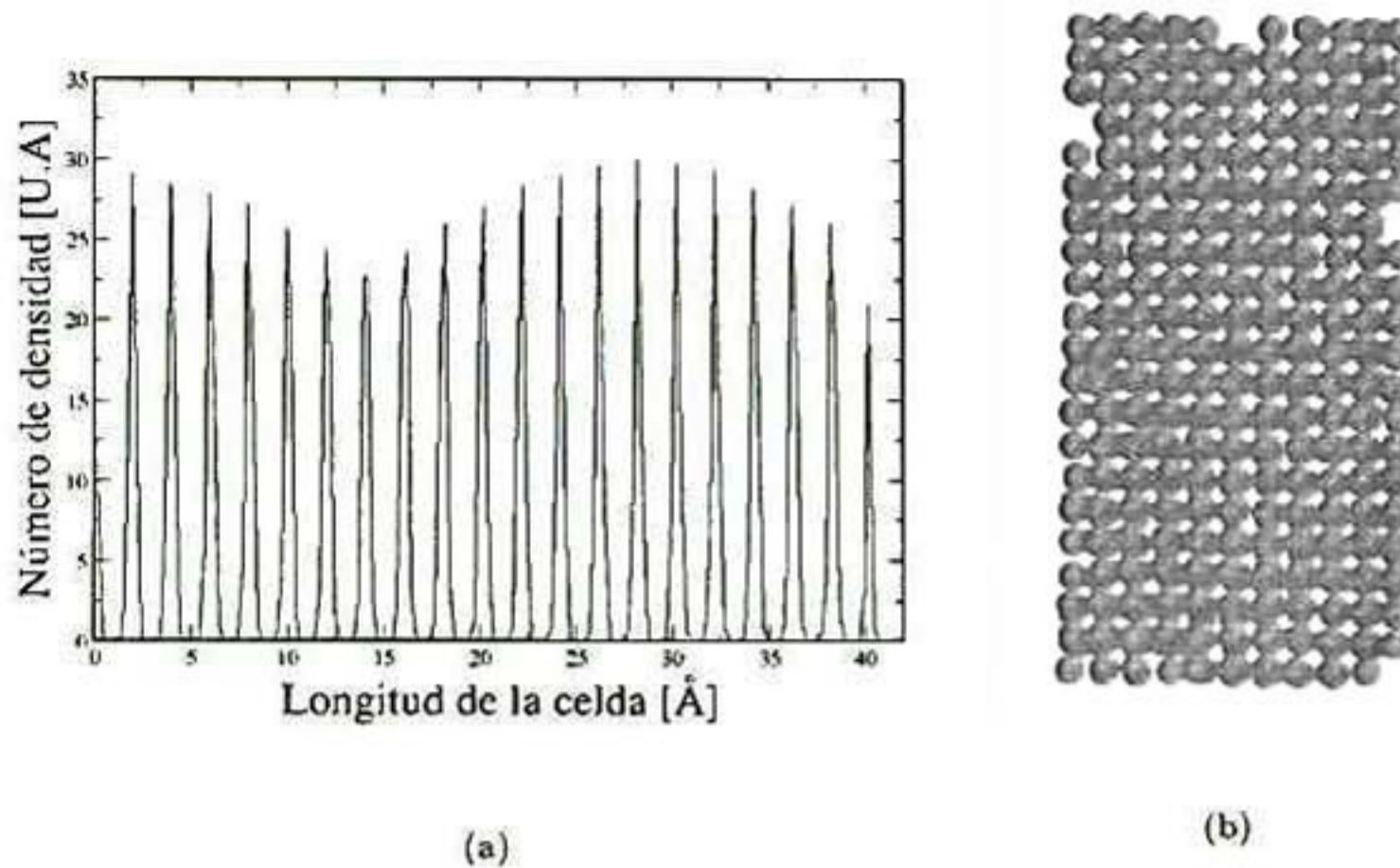


Figura 5.1: a) Perfil de densidad para el sólido a NPT ( $P=0$  bar,  $T=600$  K) como función de la longitud de celda para Aluminio b) Configuración final de los átomos a NPT ( $P=0$  bar,  $T=600$  K).

figura 5.2(a) nos muestra el perfil de densidad para el sistema. Esta figura nos sugiere la presencia de dos fases, observamos que a lo largo de la longitud de la celda, es decir desde 0 a 20 Å el sistema tiene una densidad de entre 5 y 6 lo cual sugiere la presencia de una fase predominantemente líquida. De 20 a 41 Å el sistema posee una densidad de entre 25 y 30 que como en la etapa 1 se encontró, es característica de una fase cristalina. En la figura 5.2(b) se muestra la configuración final de los átomos, observamos que los átomos de la parte superior presentan alto desorden en su configuración, lo cual es característico de un líquido, sin embargo los átomos de la parte de abajo presentan orden en su configuración tal como en la etapa 1, indicando la presencia de la fase sólida. En esta etapa se obtuvo al sólido y líquido en la misma caja de simulación.

La etapa 3 tiene como finalidad que los átomos adquieran nuevas posiciones y velocidades de acuerdo a la distribución de Maxwell, ya que en la etapa 2 la mitad de los átomos (500) se mantuvieron a una fuerza y velocidad igual a

## 5.1. TEMPERATURA DE FUSIÓN PARA ALUMINIO USANDO EAM 33

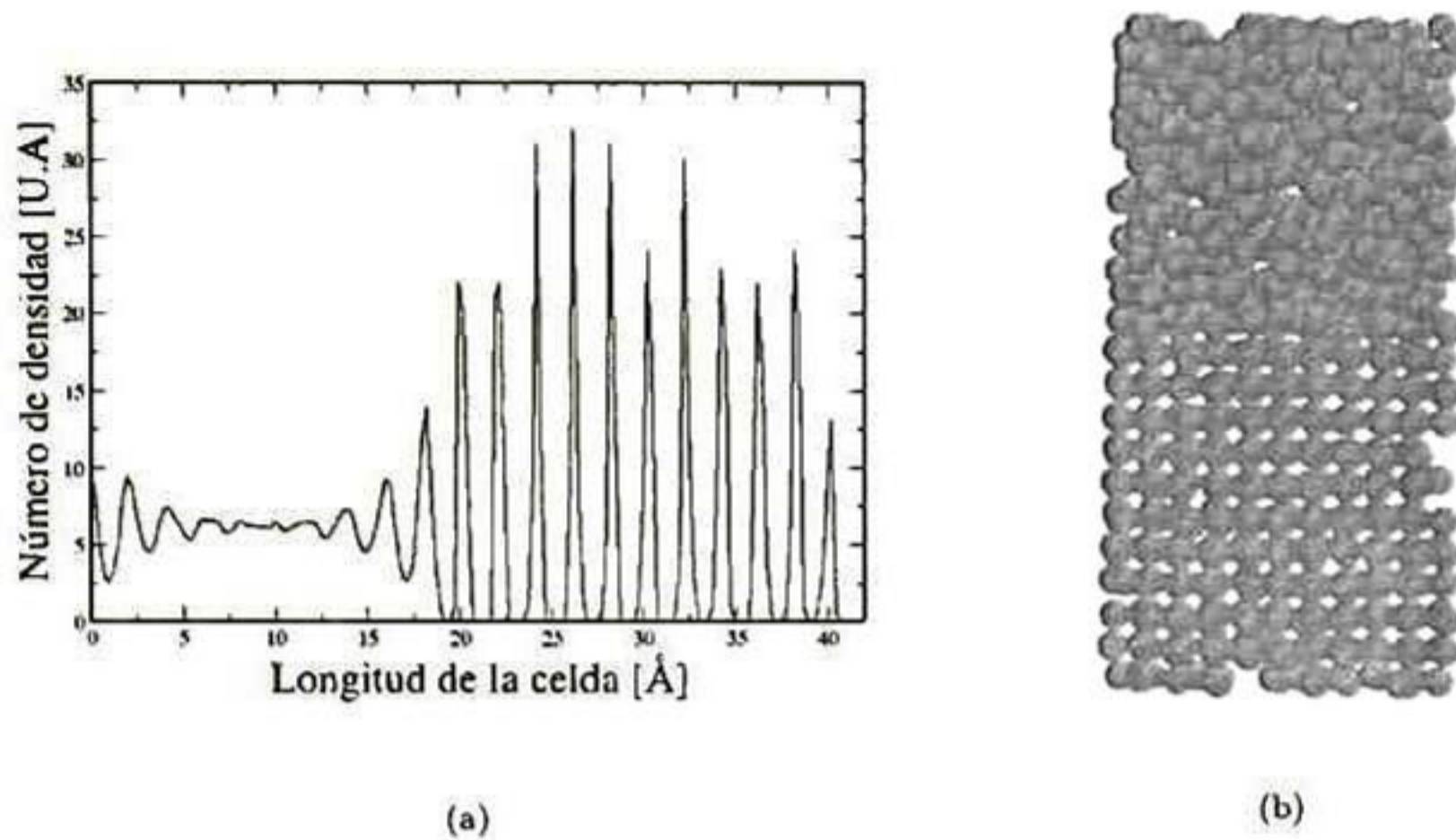


Figura 5.2: a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NVT ( $T=1500$  K) como función de la longitud de celda para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NVT ( $T=1500$  K).

cero. En la figura 5.3(a) y 5.3(b) se observa tanto el perfil de densidad como el arreglo de los átomos. Apreciamos que las fases sólida y líquida siguen presentes en la simulación.

La etapa 4 busca la coexistencia de la fase líquida y sólida por lo que se realizarán simulaciones a diferentes temperaturas a NPT. Lo que observaremos es que si temperatura a la que se fija la simulación se encuentra por debajo de la temperatura de fusión ( $T_m$ ), el líquido solidifica por lo que la fase cristalina predominará, al contrario si la temperatura a la que se fija la simulación esta por encima de  $T_m$  la fase sólida se funde y predomina la fase líquida[2].

En la figura 5.4(a) observamos el perfil de densidad a diferentes temperaturas. Aquí se observa que entre 950 K y 1050 K la fase cristalina predomina, ya que la densidad se encuentra entre 20 y 23. A 1100 K se puede apreciar que la fase líquida es la que predomina, la densidad se encuentra entre 5 y

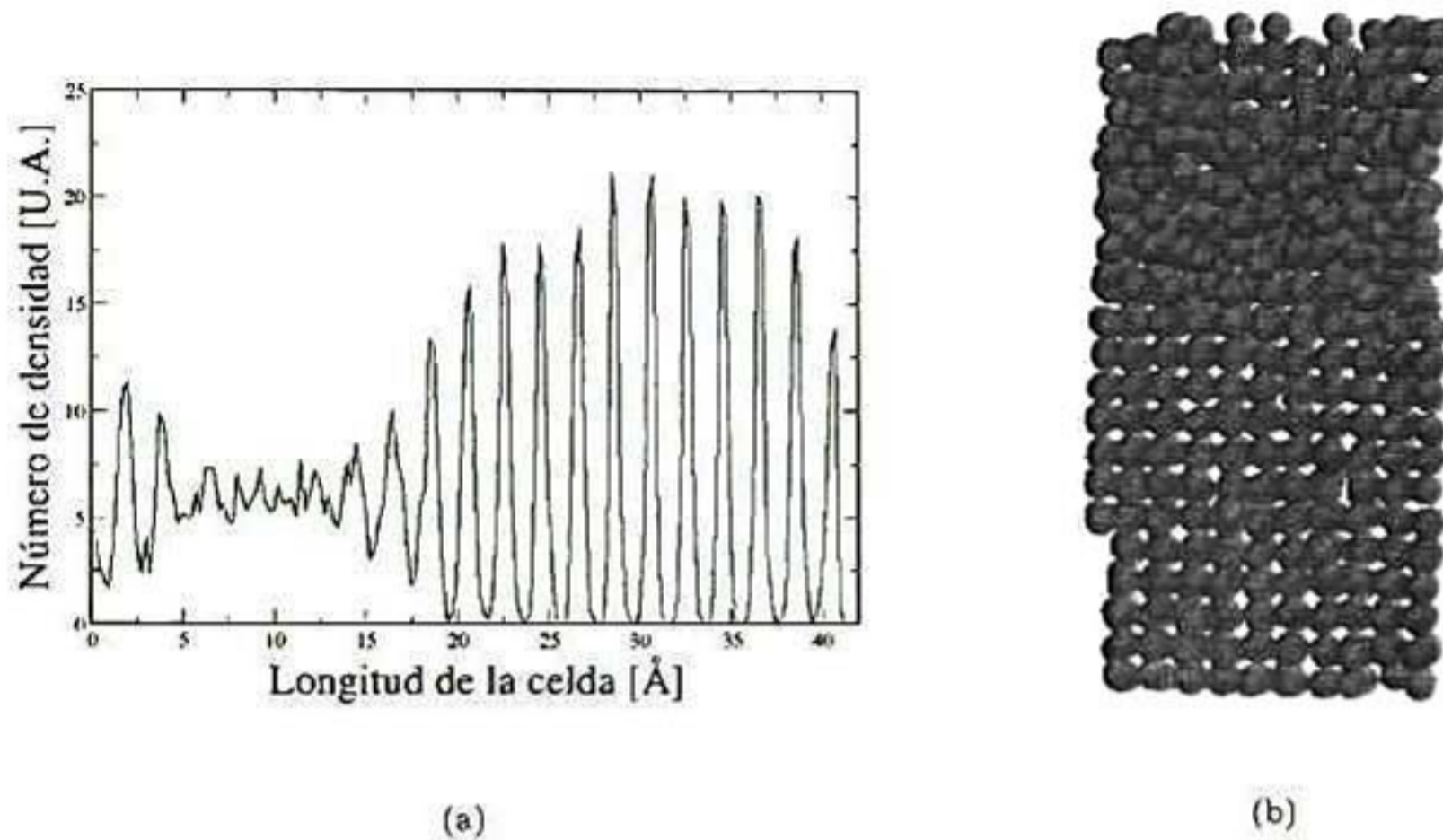


Figura 5.3: a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NPT ( $P=0$  bar,  $T=900$  K) como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a NPT ( $P=0$  bar,  $T=900$  K).

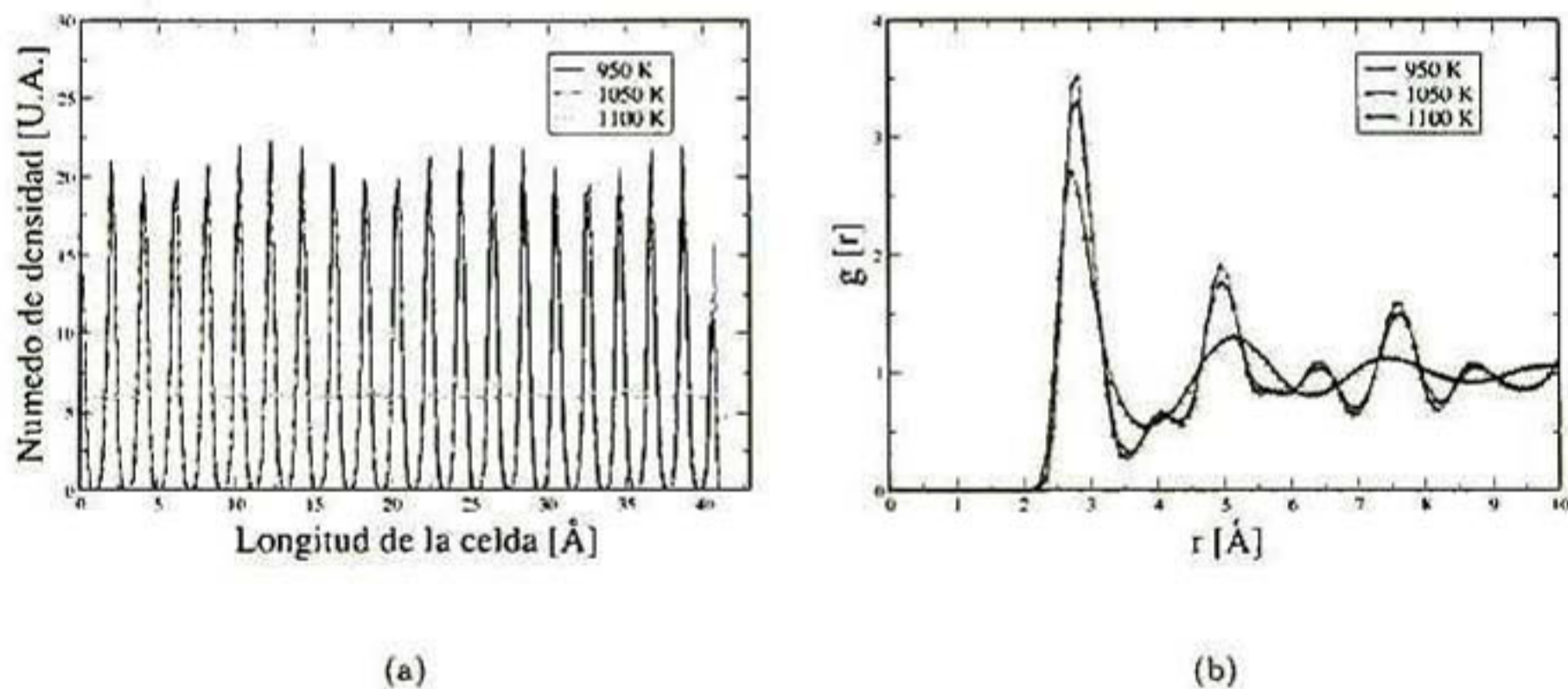


Figura 5.4: a) Perfil de densidad a 950 K, 1050 K. y 1100 K a NPT ( $P=0$  bar) como función de la longitud de celda para Aluminio. b) RDF a 950 K, 1050 K. y 1100 K para Aluminio.

6. La función de distribución radial (RDF) nos muestra las posiciones del primero, segundo, tercero hasta n-esimo vecinos, esto se puede observar a través de picos definidos. La figura 5.4(b) muestra el RDF a 950 K, 1050 K



## 5.1. TEMPERATURA DE FUSIÓN PARA ALUMINIO USANDO EAM 35

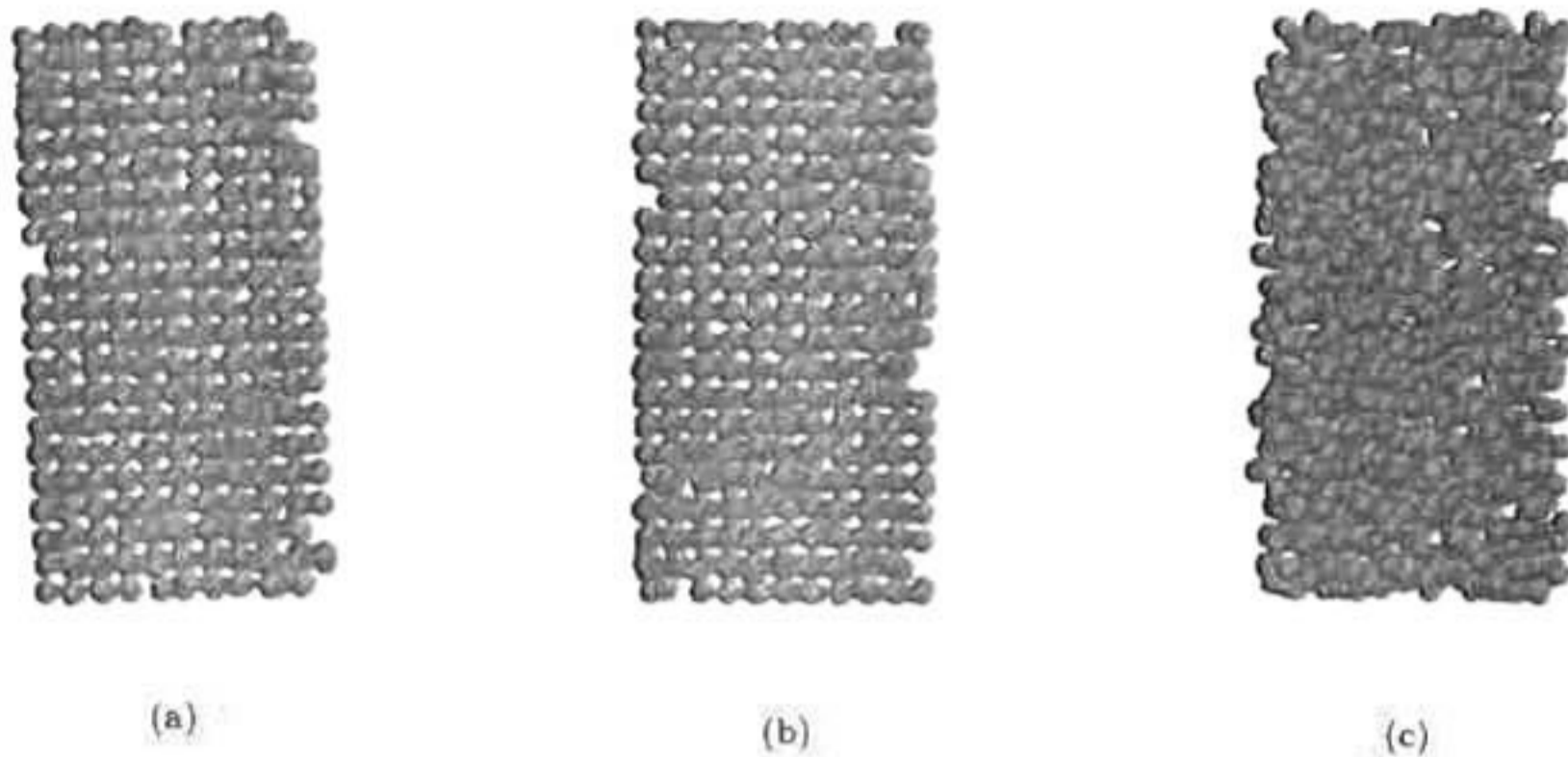


Figura 5.5: a) Configuración final de los átomos a 950 K para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a 1050 K para Aluminio. c) Configuración final de los átomos a 1100 K para Aluminio.

y 1100 K. Observamos que a 950 K y 1050 K los picos se encuentran bien definidos lo cual es característico de un sólido cristalino, mientras que a 1100 K se observa que el segundo pico que a 950 K y 1050 K se observaba desaparece y se hace más ancho lo cual es característico de un sistema altamente desordenado en este caso un líquido. En la figura 5.11 observamos la configuración final de los átomos a 950 K, 1050 K y 1100 K, apreciamos que a 950 K y 1050 K el sistema se cristaliza mientras que a 1100 K la fase líquida es la que predomina.

La figura 5.6 muestra el comportamiento de la energía potencial ( $E_p$ ), volumen ( $V$ ) y entalía ( $H$ ) como función de la temperatura. Observamos que a 1100 K la energía potencial, el volumen y la entalpía tienen un aumento abrupto, lo que sugiere que el sistema se ha fundido. Por lo tanto, el movimiento de los átomos será mayor lo cual genera mayores colisiones y expansión en el sistema, esto se ve reflejado en el aumento del volumen. La energía potencial aumenta debido a que las partículas tienen mayor interacción. Los cálculos realizados nos sugieren que la temperatura de fusión del

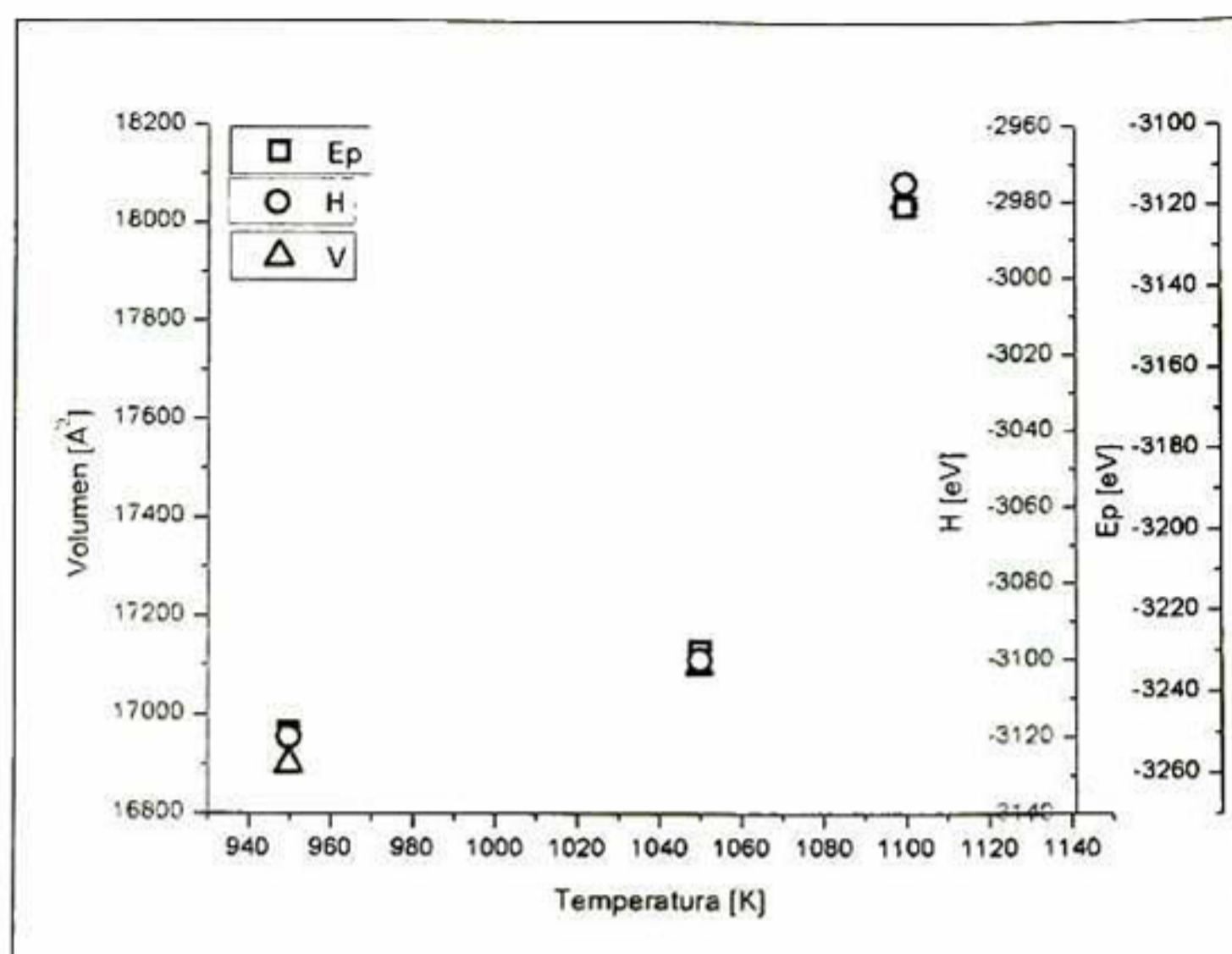


Figura 5.6: La energía potencial ( $E_p$ ), Entalpía ( $H$ ) del volumen ( $V$ ) como función de la temperatura para Aluminio a NPT ( $P=0$  bar,  $T=950$ ,  $1050$  y  $1100$  K respectivamente).

aluminio utilizando el EAM es cercana a  $1100$  K, la cual esta por encima de la experimental  $166.5$  K, esta sobre estimación nos sugiere que debe de hacerse una reparametrización en el potencial.

## 5.2. Temperatura de fusión para Aluminio usando EAM/FS

Para la simulación realizada usando el potencial EAM/FS se llevaron a cabo las mismas etapas que en la sección 5.1 los resultados obtenidos se muestran a continuación.

La figura 5.7(a) nos muestra el perfil de densidad para la etapa 1. Podemos observar que la densidad se encuentra entre 25 y 30, lo que nos indica que tenemos un sistema sólido. En la figura 5.7(b) podemos apreciar la configu-

## 5.2. TEMPERATURA DE FUSIÓN PARA ALUMINIO USANDO EAM/FS37

ración final del sistema, la cual se observa ordenada, lo que nos sugiere una fase sólida.

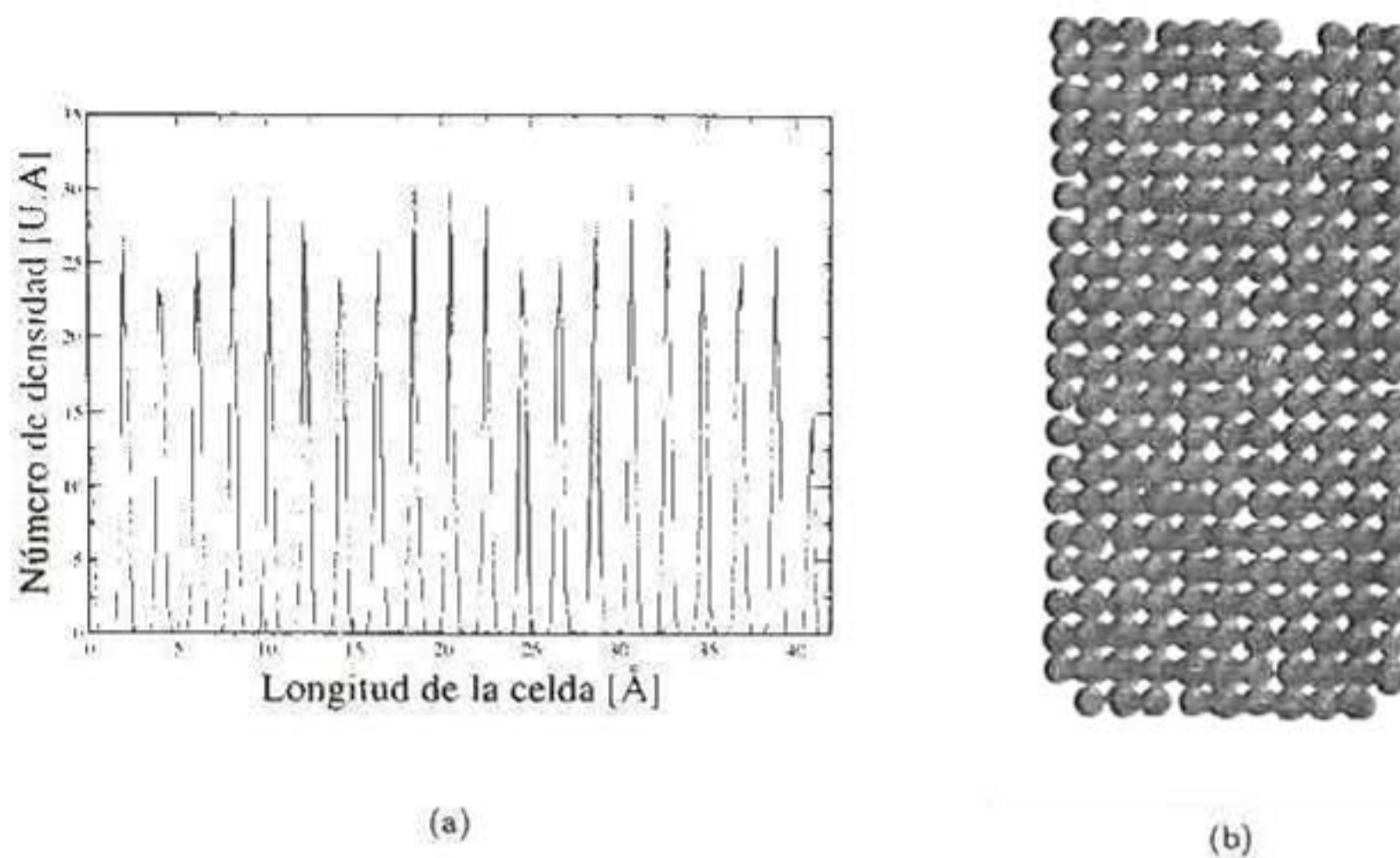


Figura 5.7: a) Perfil de densidad para el sólido a NPT ( $T=600$  K,  $P=0$  bar) como función de la longitud de celda usando EAM/FS para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NPT ( $T=600$  K,  $P=0$  bar) usando EAM/FS para Aluminio.

En la figura 5.8(a) se observa el perfil de densidad para la etapa 2. De 0 a 20 Å apreciamos que la densidad se encuentra entre 5 y 6 lo cual sugiere la presencia de un sistema líquido. De 20 a 42 se tiene una densidad de entre 25 y 30 que como anteriormente en la etapa 1 se encontró nos indica una fase sólida. En la figura 5.8(b) se presenta la configuración final del sistema. Los átomos de la parte superior se encuentran completamente desordenados lo cual nos indica que tenemos una fase líquida, mientras que los átomos de la parte de abajo se observan en una configuración ordenada indicándonos la presencia de un sólido. En las figuras 5.9(a) y 5.9(b) observamos que el sistema adquirió una nueva configuración, pero manteniendo la fase sólida así como la líquida.

En la figura 5.10(a) representamos el perfil de densidad a diferentes temperaturas. Observamos que a 950 K la fase líquida es la que predomina.

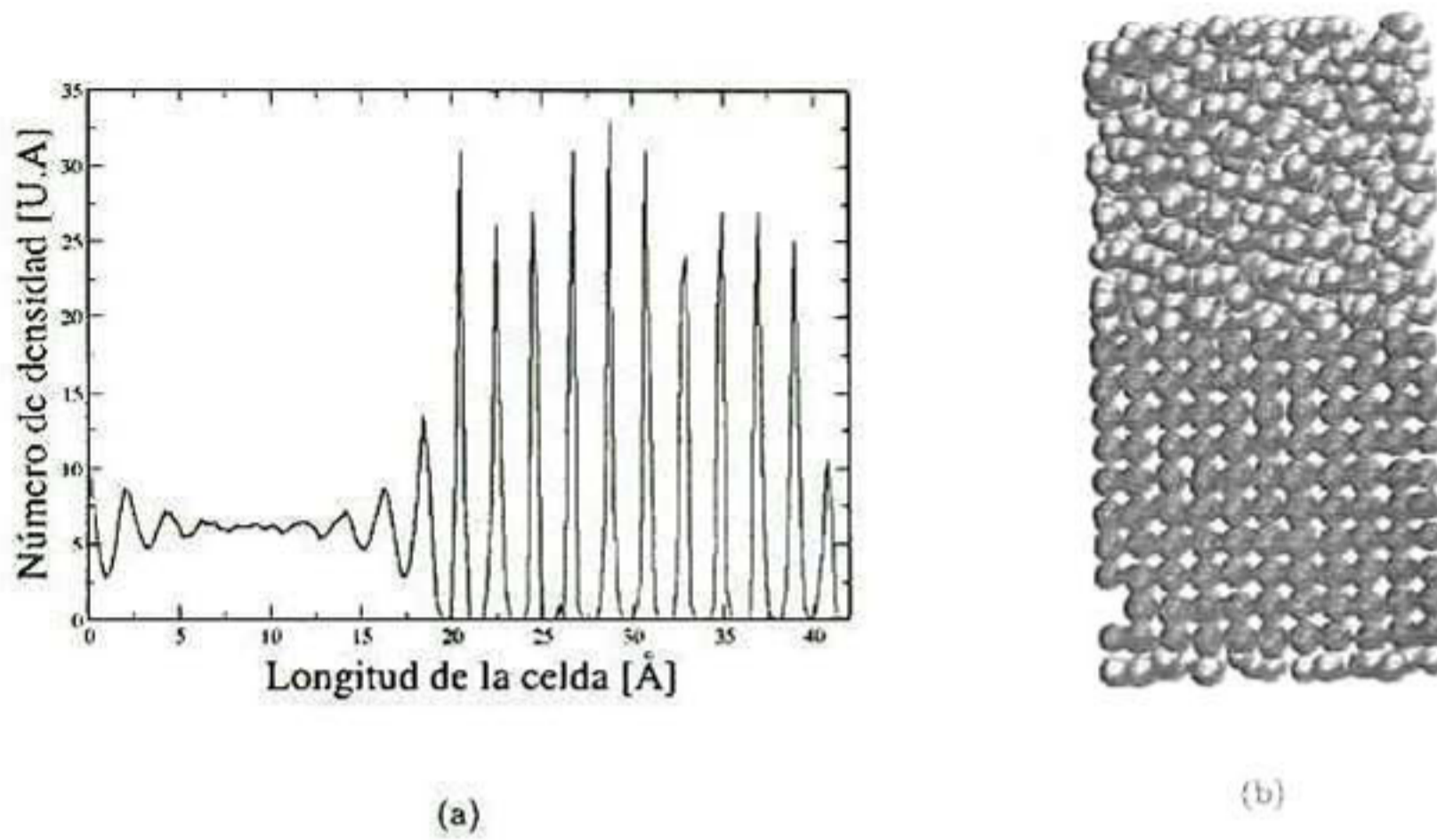


Figura 5.8: a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NVT ( $T=1500$  K) como función de la longitud de celda usando EAM/FS para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NVT ( $T=1500$  K) usando EAM/FS para Aluminio

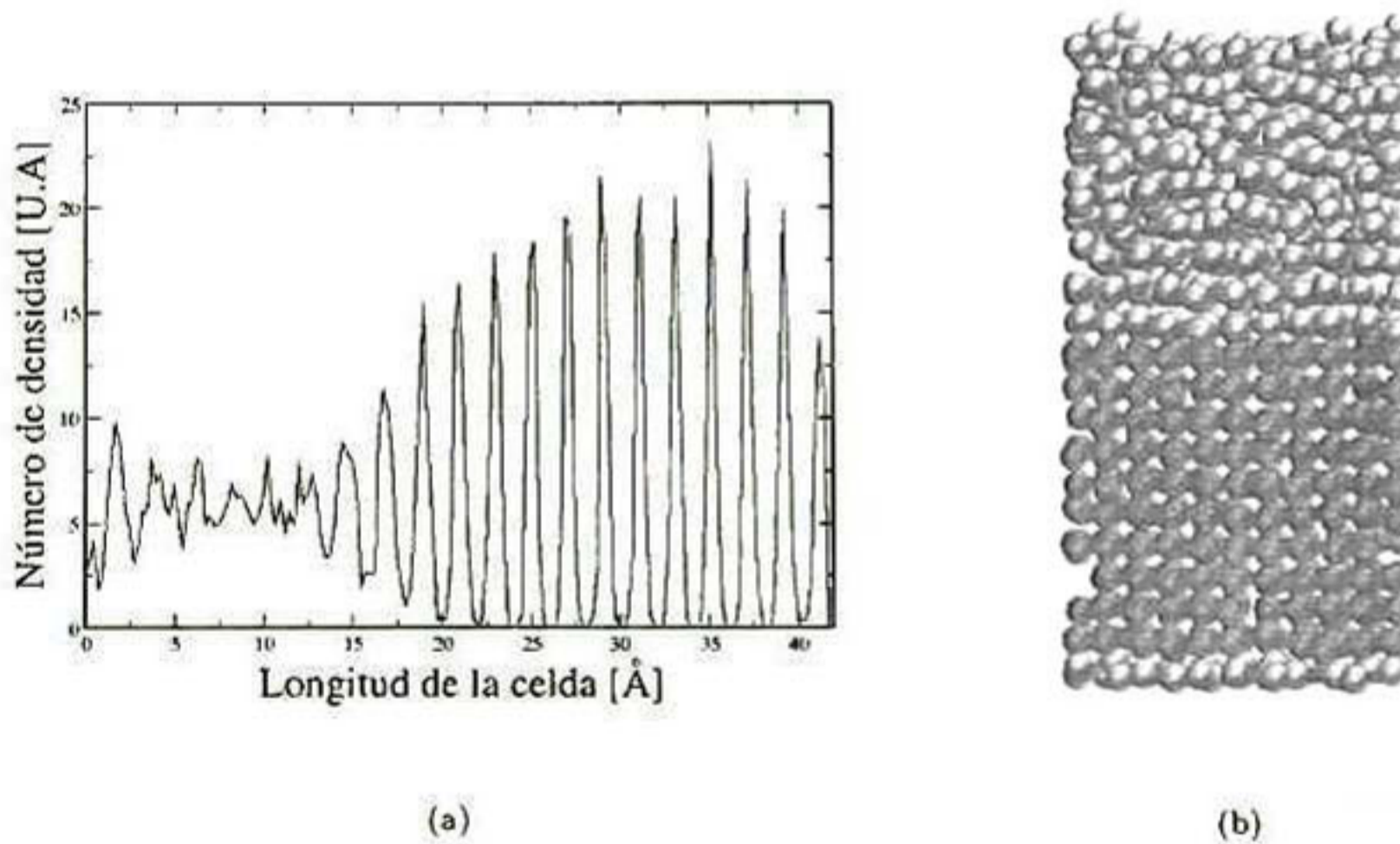


Figura 5.9: a) Perfil de densidad para el sólido y líquido a NPT ( $T=900$  K,  $P=0$  bar) como función de la longitud de celda usando EAM/FS para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a NPT ( $T=900$  K,  $P=0$  bar) usando EAM/FS para Aluminio

## 5.2. TEMPERATURA DE FUSIÓN PARA ALUMINIO USANDO EAM/FS39

También lo podemos apreciar en la el RDF (5.10(b)) donde a 920 K y a 940 K los picos se encuentran bien definidos, sin embargo a 950 K, el segundo pico que aparecía a 920 K y 940 K desaparece y se hace ancho, lo cual es característico de un liquido.

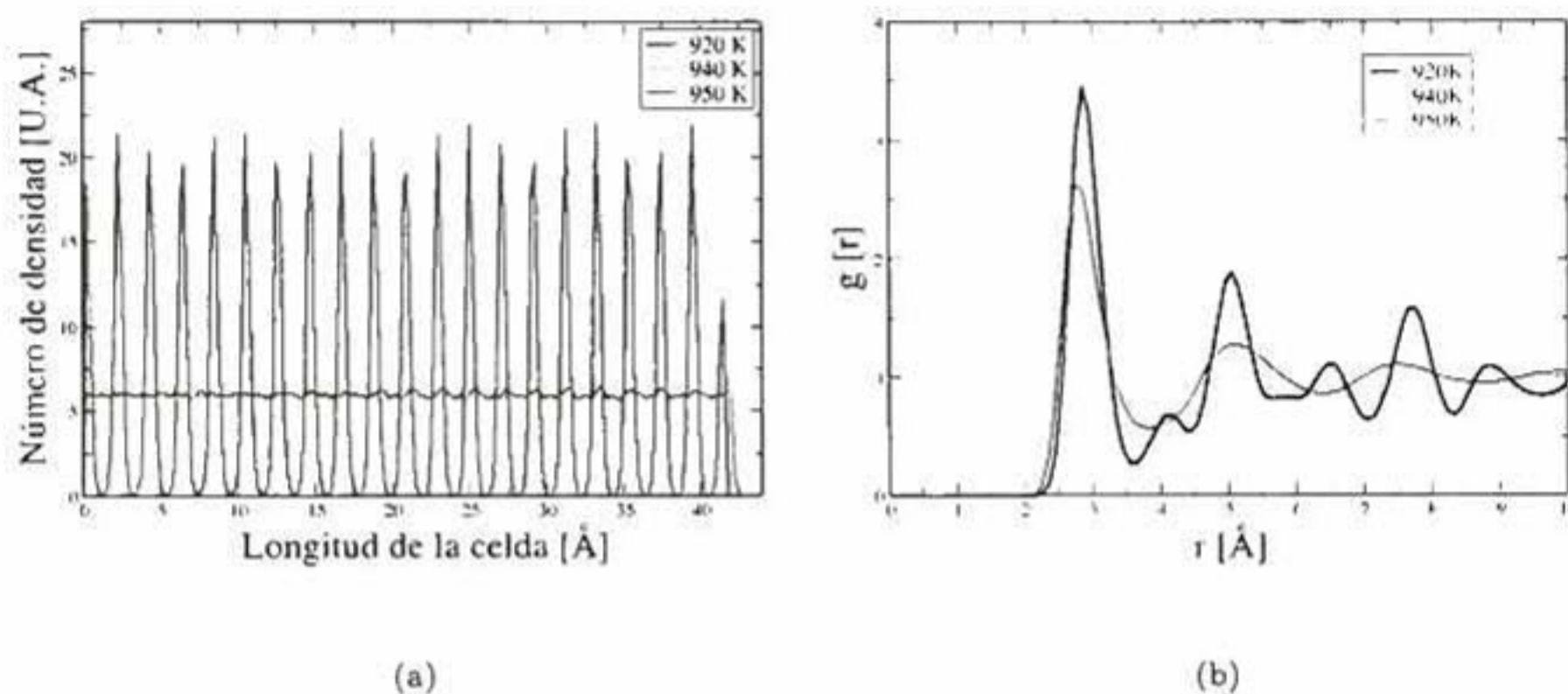


Figura 5.10: a) Perfil de densidad a 920 K, 940 K y 950 K a NPT(P=0 bar) como función de la longitud de celda para Aluminio . b) RDF a 920 K, 940 K y 950 K para Aluminio

La figura 5.11 muestra como cambia la configuración final de los átomos con el aumento de la temperatura.

En la figura 5.12 podemos apreciar el comportamiento de la energía potencial ( $E_p$ ), el volumen ( $V$ ) y la entalpía como función de la temperatura. Observamos que conforme aumenta la temperatura estas cantidades también aumentan. A 950 K encontramos un aumento abrupto en el  $E_p$ ,  $V$  y  $H$ , lo cual sugiere que la fase líquida es la que predomina. Este aumento se debe a que los átomos en fase líquida adquieren mayor energía lo cual conlleva a una expansión en el sistema.

Los calculos realizados utilizando el potencial EAM/FS nos sugieren que la temperatura de fusión se encuentra cercana a 950 K, la cual esta en acuerdo con la experimental. La tabla 5.1 muestra temperaturas de fusión obtenidas

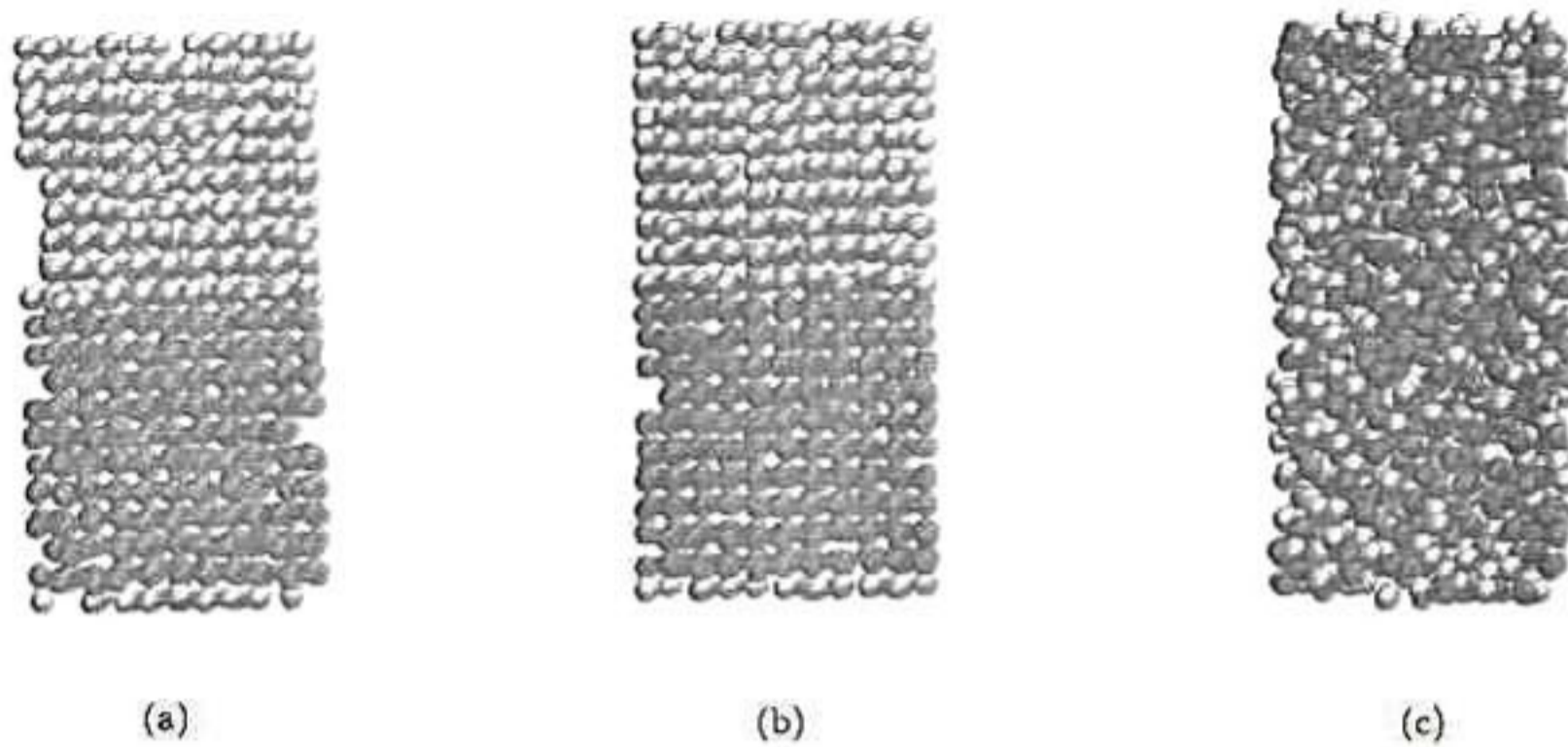


Figura 5.11: a) Configuración final de los átomos a 920 K para Aluminio. b) Configuración final de los átomos a 940 K para Aluminio. c) Configuración final de los átomos a 950 K para Aluminio.

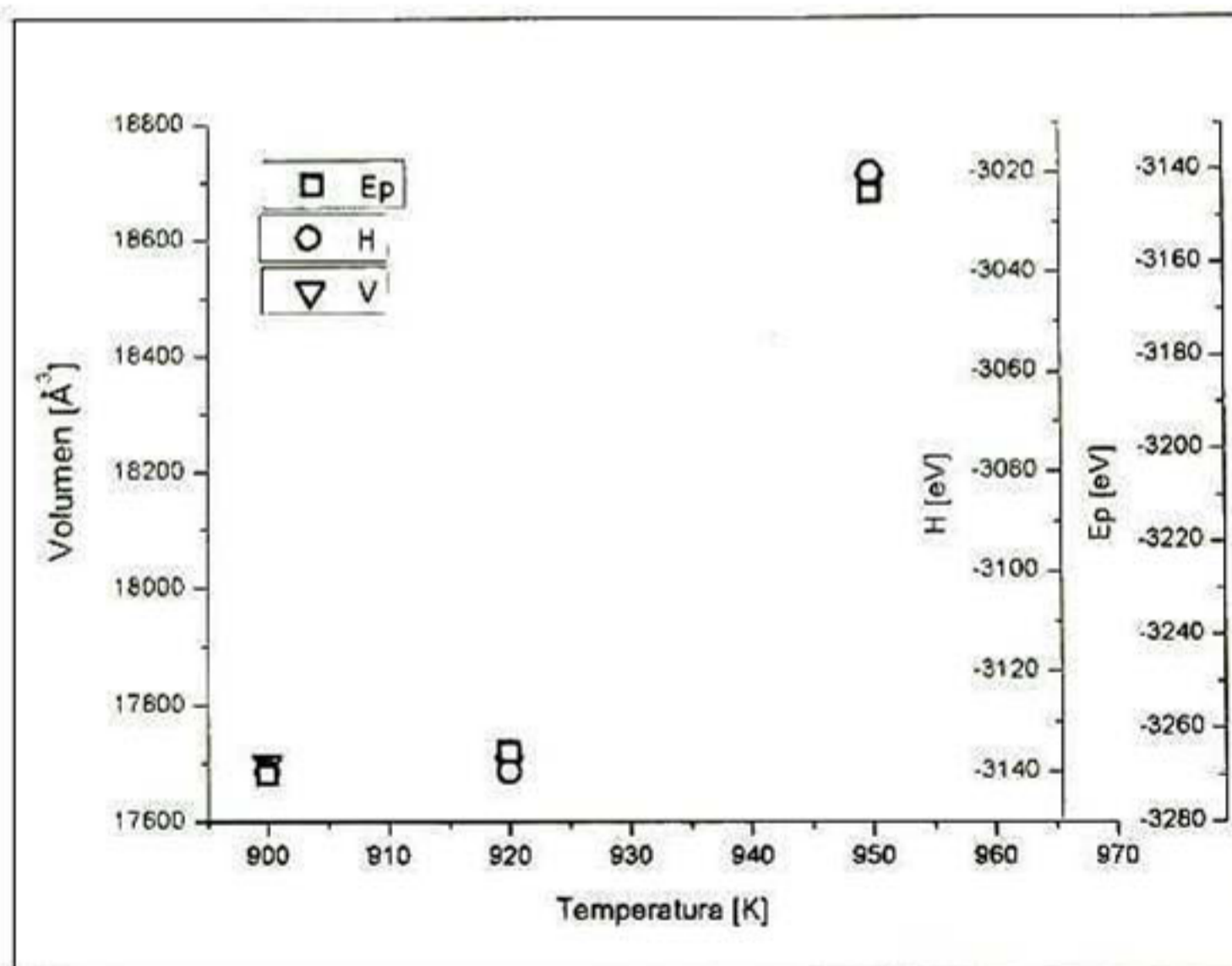


Figura 5.12: La energía potencial ( $E_p$ ), Entalpía ( $H$ ) y volumen ( $V$ ) como función de la temperatura para Aluminio a NPT ( $P=0$  bar,  $T=920$ ,  $940$  y  $950$  K respectivamente).

en este trabajo y las obtenidas en los trabajos de Bedoya-Martínez *et. al.*[2], Davenport *et. al.*[35] y Morris *et. al.*[39] para Aluminio. Observamos que usando el potencial EAM obtenemos que la temperatura de fusión esta por

Cuadro 5.1: Temperaturas de fusión para el Aluminio

Método	$T_m$
En este trabajo EAM	1100 K
En este trabajo EAM/FS	950 K
Por energía libre [35]	$809 \pm 9K$
Por coexistencia de fases [39]	$724 \pm 10K$
Por energía libre[2]	$870 \pm 5K$
Experimental [32]	933.5 K

encima de la experimental 166.5 K. Sin embargo la temperatura obtenida usando EAM/FS es muy cercana a la experimental[32].

### 5.3. Temperatura de fusión para la aleación $Al_3Fe$

En esta sección mostramos los resultados obtenidos para el calculo de la temperatura de fusión para la aleación  $Al_3Fe$ . Este calculo se llevo a cabo de la misma forma que en la secciones 5.1 y 5.2.

La figura 5.13 nos muestra el perfil de densidad y la configuración final de los átomos a 900 K y 0 bar. Observamos en la figura 5.13(a) que la densidad se encuentra entre 28 y 34 lo que sugiere la presencia de una fase sólida. Esto lo podemos apreciar también en la figura 5.13(b) ya que los átomos se encuentran completamente ordenados.

La figura 5.14(a) muestra el perfil de densidad así como la configuración de los átomos. Podemos apreciar la presencia de 2 fases, de 0 a 16 Å encontramos una densidad de entre 6 y 7 lo que nos indica que tenemos la fase líquida.

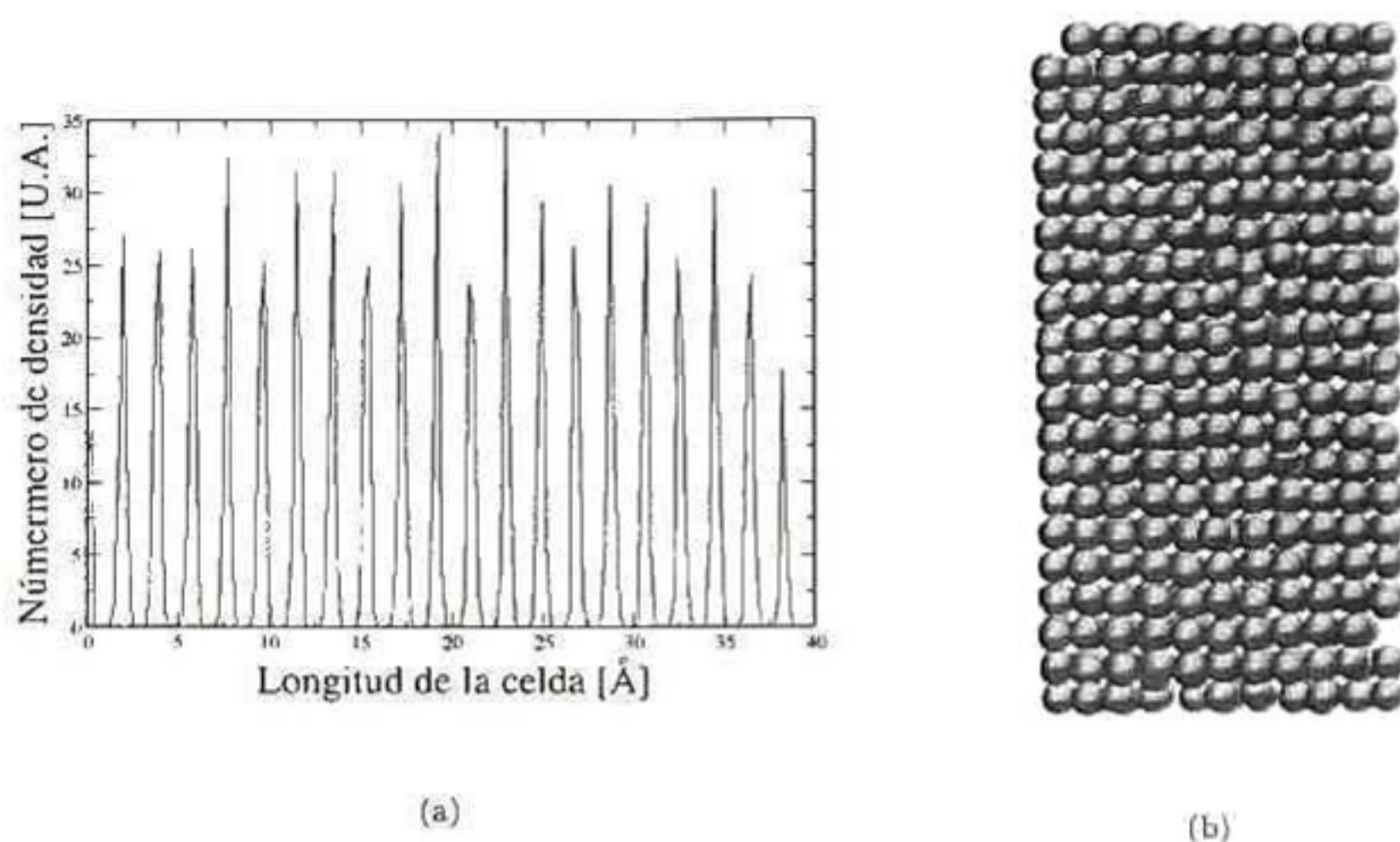


Figura 5.13: a) Perfil de densidad para el sólido a NPT ( $T=900$  K,  $P=0$  bar) para la aleación  $Al_3Fe$  como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a ( $T=900$  K,  $P=0$  bar) para la aleación  $Al_3Fe$

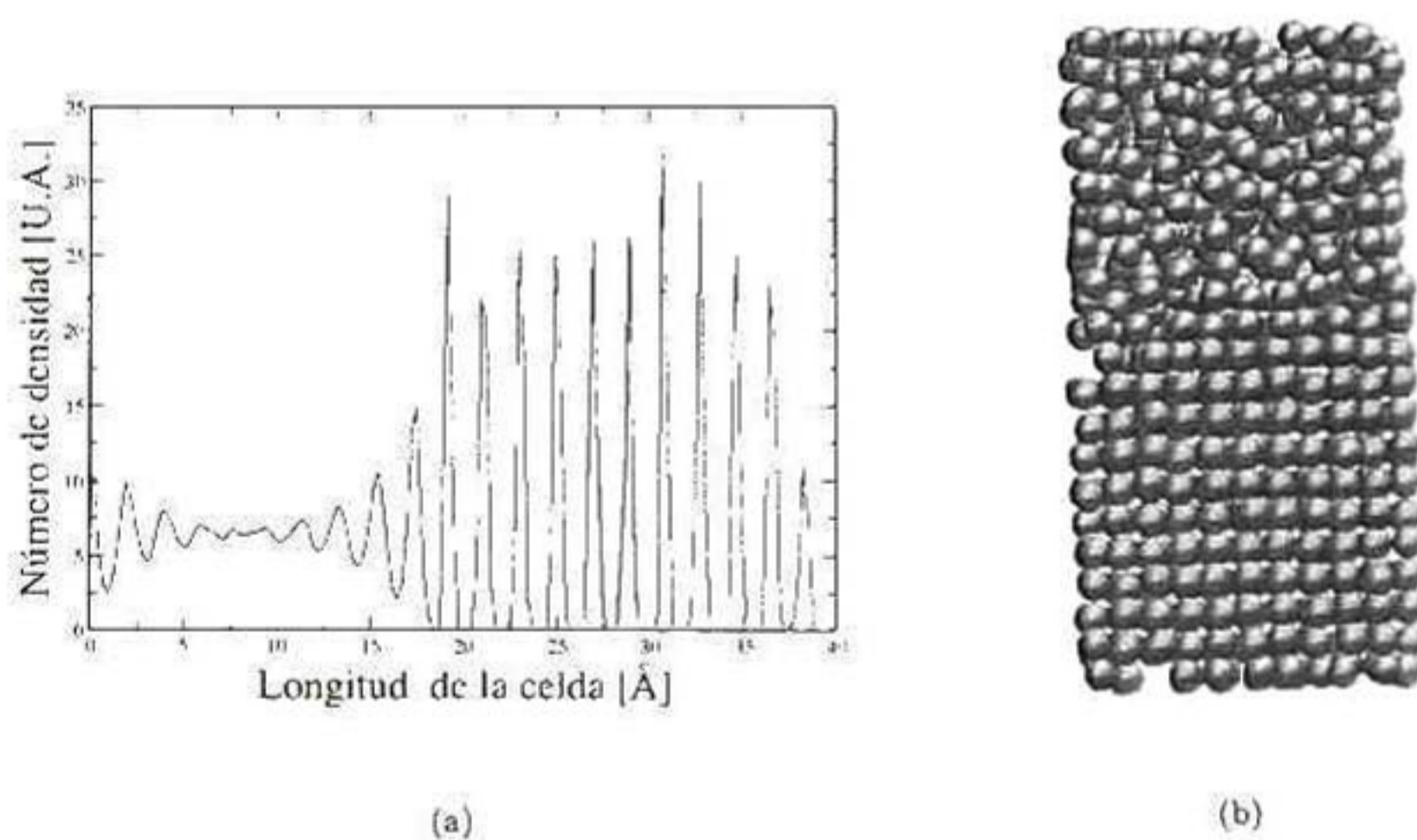
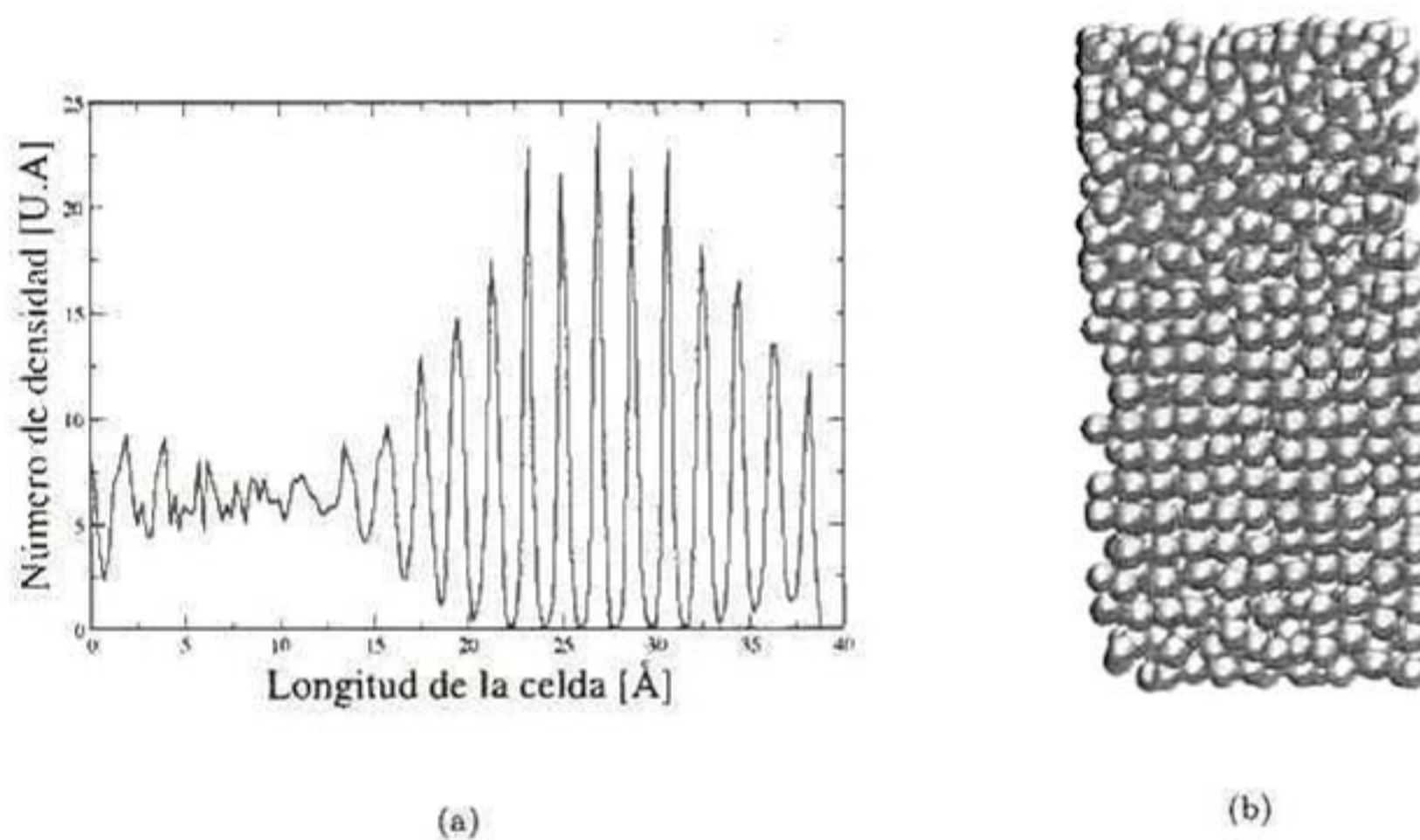


Figura 5.14: a) Perfil de densidad para el sólido y el líquido a NVT ( $T=1600$  K) para la aleación  $Al_3Fe$  como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a NVT ( $T=1600$  K) para la aleación  $Al_3Fe$



De 16 a 38 Å observamos una densidad de entre 28 y 35 igual que en la etapa 1, por lo que tenemos una fase sólida. En la figura 5.13(b) observamos que los átomos de la parte superior se encuentran desordenados, lo cual es característico de un líquido. Los átomos de la parte de abajo se encuentran bien ordenados indicándonos la presencia de la fase sólida. En esta etapa obtuvimos que el líquido y el sólido se encontraran en la misma caja de simulación.



**Figura 5.15:** a) Perfil de densidad para el sólido y el líquido a NPT ( $T=1100$  K,  $P=0$  bar) para la aleación  $Al_3Fe$  como función de la longitud de celda. b) Configuración final de los átomos a NPT ( $T=1100$  K,  $P=0$  bar) para la aleación  $Al_3Fe$ .

El objetivo de la tercer etapa como ya se dijo anteriormente es proporcionar nuevas posiciones y velocidades a los átomos de acuerdo a la distribución de Maxwell. Por lo que la figura 5.15 muestra el perfil de densidad y la configuración de átomos. Lo que observamos es que seguimos teniendo presentes tanto la fase sólida como la líquida.

La figura 5.16(a) muestra el perfil de densidad a 1350, 1400 y 1450 K respectivamente. Observamos que a 1450 K el sistema es predominantemente

líquido. El RDF (fig. 5.16(b)) nos indica que el hombro que aparece a 3.5 Å tiende a desaparecer con el aumento de la temperatura. El pico que aparece a 4.2 Å se vuelve más ancho conforme aumenta la temperatura. La figura 5.17 nos indica la evolución de la configuración final de los átomos con el aumento de la temperatura.

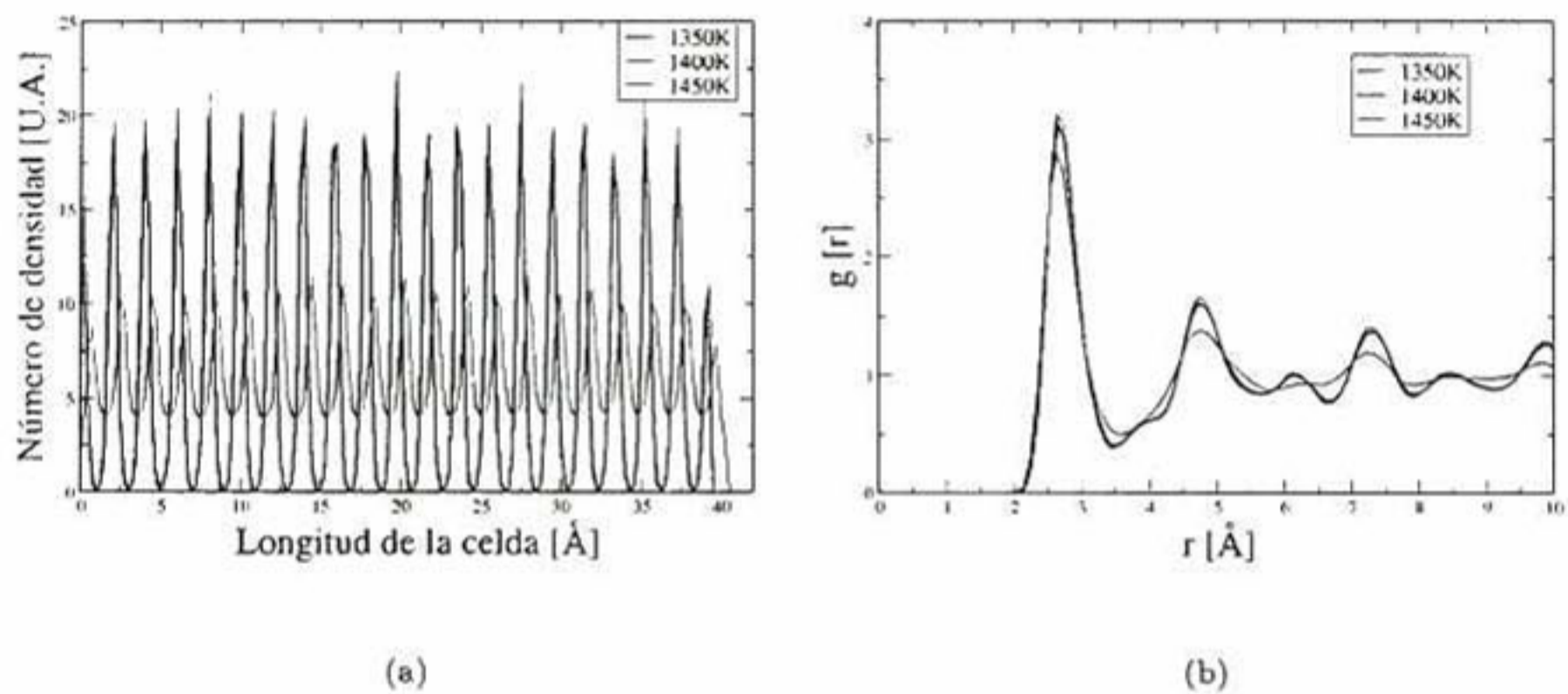


Figura 5.16: a) Perfil de densidad a 1350 K, 1400 K y 1450 K a NPT ( $P=0$  bar) como función de la longitud de celda para la aleación  $Al_3Fe$ . b) RDF a 1350 K, 1400 K y 1450 K para la aleación  $Al_3Fe$ .

La figura 5.18 nos muestra el comportamiento de  $E_p$ ,  $V$  y  $H$  en función de la temperatura. Observamos que a 1450 K  $E_p$ ,  $V$  y  $H$  aumentan sugiriéndonos la presencia de la fase líquida. En un líquido el número de colisiones entre los átomos aumentan por lo que la energía potencial tiende a aumentar y el sistema a expandirse. Los cálculos realizados nos llevan a la conclusión de que la temperatura de fusión, calculada por co-existencia de fases en este trabajo para la aleación  $Al_3Fe$  se encuentra cerca de 1450 K, la cual está en acuerdo con la reportada en el diagrama de fase Al-Fe que es de 1430.15 K [28].

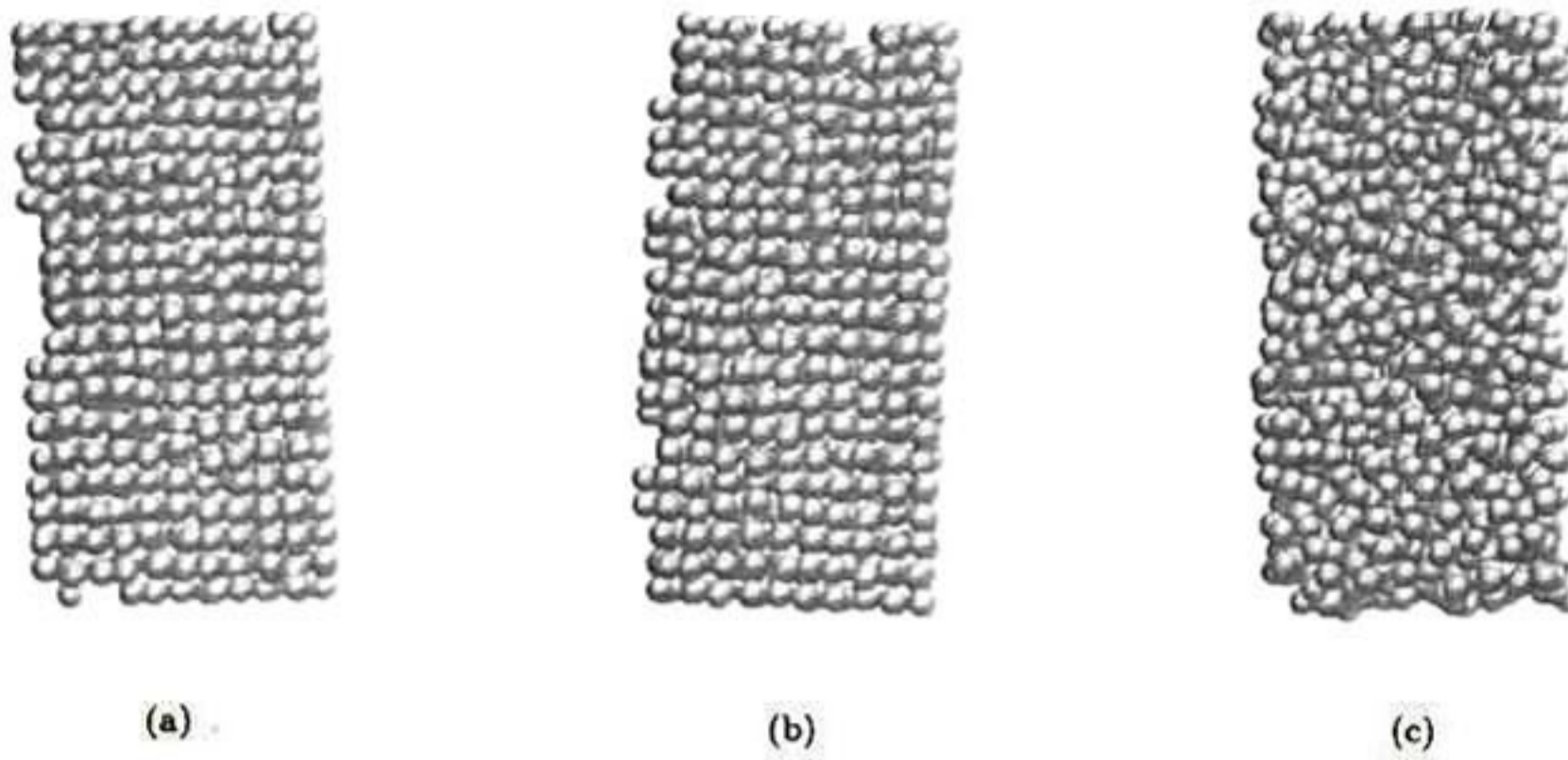


Figura 5.17: a) Configuración final de los átomos a 1350 K para la aleación  $Al_3Fe$ . b) Configuración final de los átomos a 1400 K para la aleación  $Al_3Fe$ . c) Configuración final de los átomos a 1450 K para la aleación  $Al_3Fe$ .

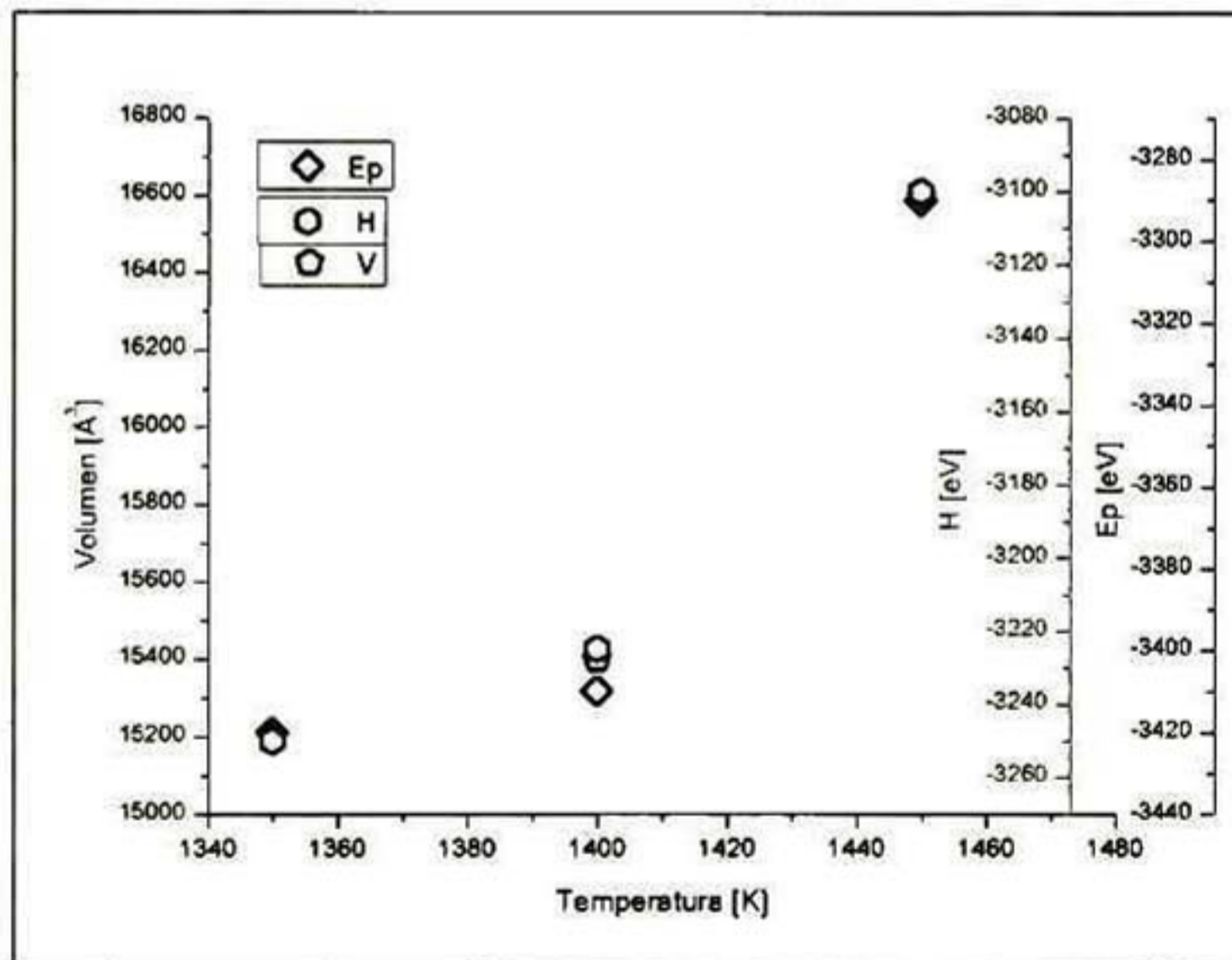
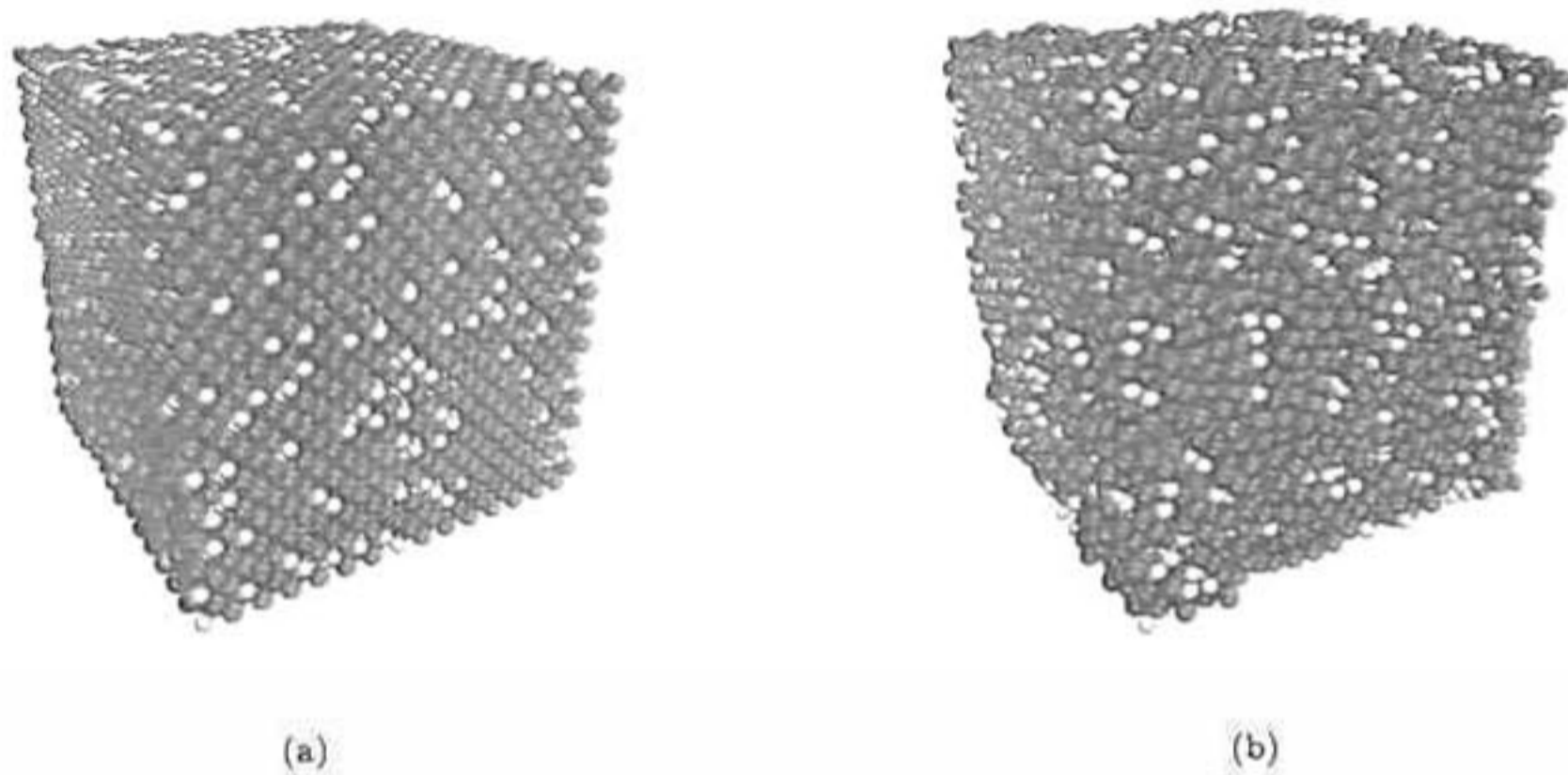


Figura 5.18: Energía potencial (Ep), Volumen (V) y Entalpía como función de la temperatura  $Al_3Fe$  a NPT ( $P=0$  bar,  $T=1350, 1400$  y  $1450$  K respectivamente).

## 5.4. Vidrios metálicos

En este trabajo se estudio la formación de vidrio metálico del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$ , la simulación fue realizada para 13500 átomos con condiciones periódicas en xyz, se uso Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [22], que es un código basado en dinámica molecular clásica. La velocidad de enfriamiento utilizada fue de  $5,5^{13}K/s$ . Los resultados obtenidos en este trabajo se muestran a continuación:



**Figura 5.19:** Caja de simulación en 3D del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$ : a) Comenzando la sistema a 300 K b) Estado final del Vidrio Metálico.

En la figura 5.19 observamos la configuración de los átomos a 300 K y cuando se forma el vidrio metálico.

La figura 5.20 nos muestra como cambia el volumen como función de la temperatura. Durante el calentamiento observamos una transición de primer orden [12] [30], la cual es observada a 1406 K ( $1132.8^{\circ}C$ ), esta nos indica la temperatura de fusión ( $T_m$ ) de la aleación. En la curva del enfriamiento es observado un cambio de pendiente a 762 K, este cambio nos indica la temperatura de transición vítrea, estos cambios se observan el las figuras 5.20(a) y

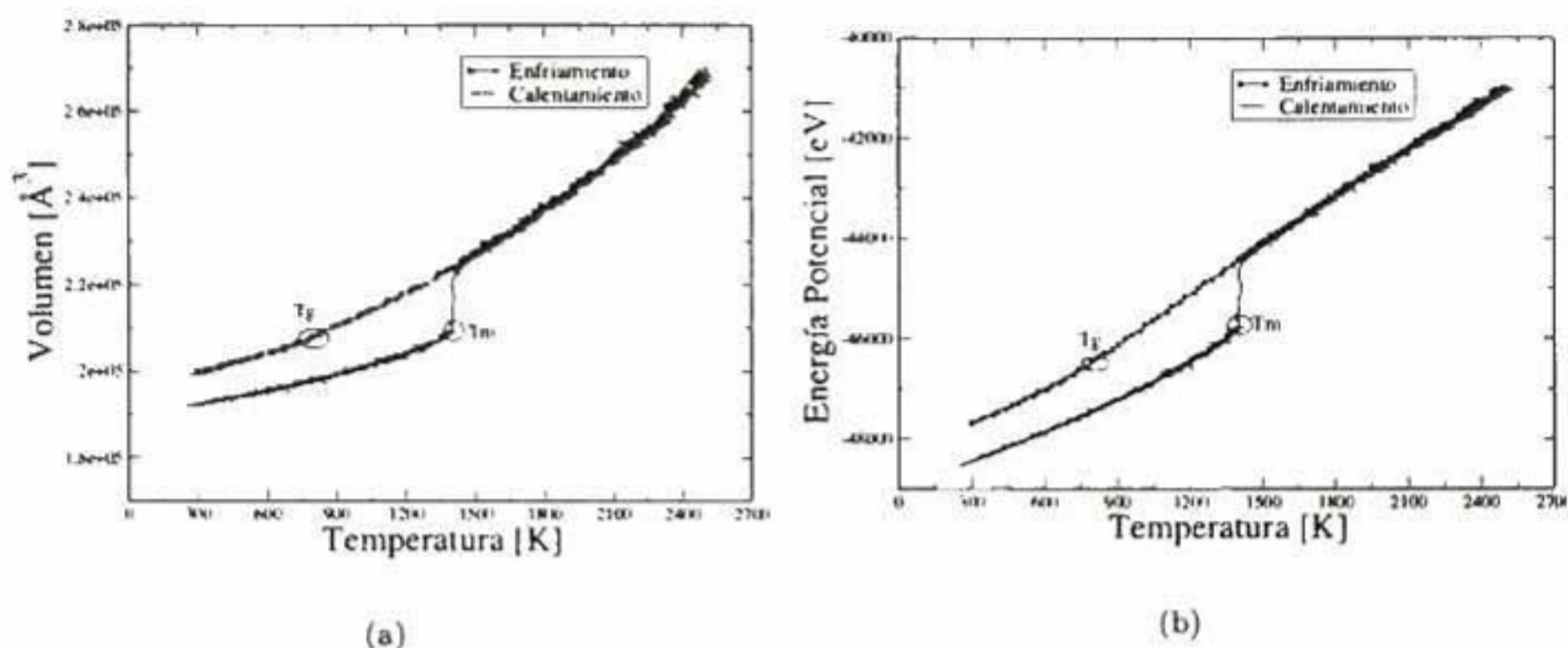


Figura 5.20: a) Comportamiento del volumen en función de la temperatura durante el calentamiento y enfriamiento del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$  a una presión de 0 GPa. b) Comportamiento de la energía potencial en función de la temperatura durante el calentamiento y enfriamiento del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$  a una presión de 0 GPa.

5.20(b). El estudio de temperatura de fusión y temperatura de transición vítrea se llevo a cabo a diferentes presiones; en este caso las presiones estudiadas fueron: 0, 3, 6 y 12 GPa respectivamente.

En la figura 5.21 observamos el cambio del volumen en función de la temperatura a 3, 6, 9 y 12 GPa respectivamente. Se aprecia que la temperatura de fusión aumenta linealmente conforme aumenta la presión, esto se puede ver claramente en la figura 5.22, mientras que la temperatura de transición vítrea aumenta exponencialmente con el aumento de la presión, lo cual podemos observar en la figura 5.23.

La función de distribución radial (RDF) nos muestra las posiciones del primero, segundo, tercero hasta nth vecinos, esto se puede observar a través de picos definidos. En este caso la figura 5.24 nos muestra el RDF de los pares de Fe-Fe 5.24(a), Fe-Al 5.24(b) y Al-Al 5.24(c) a 0, 6 y 12 GPa respectivamente. Lo que observamos es que a 300 K tenemos un sistema cristalino, esto debido a que los picos presentes se encuentran bien definidos, sin embar-

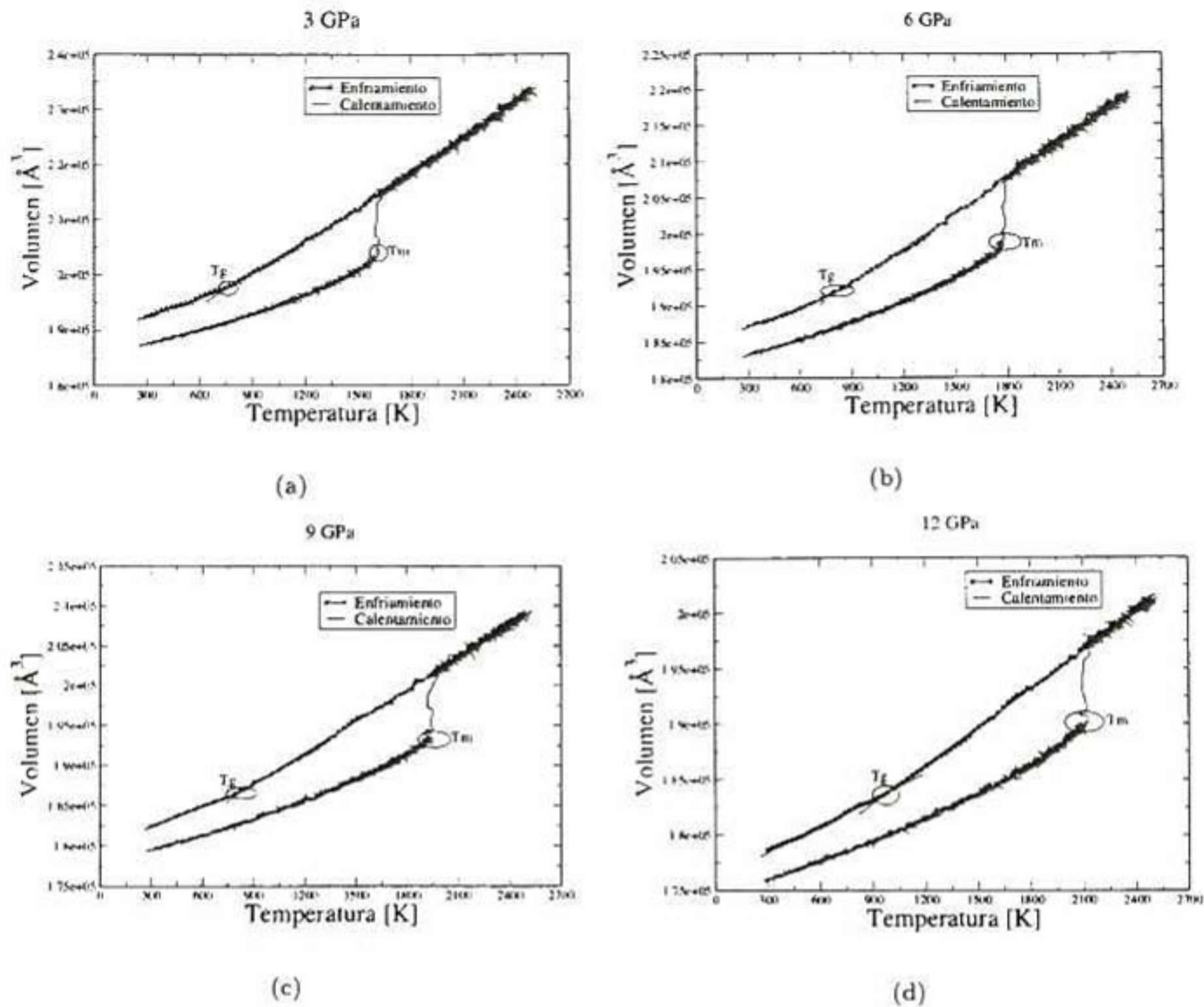


Figura 5.21: Comportamiento del volumen en función de la temperatura durante el calentamiento y enfriamiento del sistema  $Al_{75}Fe_{25}$  a a) 3 GPa, b) 6 GPa, c) 9 GPa y c) 12 GPa.

go cuando el sistema se encuentra 2500 K apreciamos como emerge un pico ancho que nos indica que la estructura se encuentra altamente desordenada, esto es característico de un líquido. Después cuando se forma el MG observamos un desdoblamiento en el segundo pico, lo que nos indica que tenemos un empaquetamiento atómico más allá del primer vecino, este desdoblamiento es característico de una estructura de un sólido amorfo en este caso un vidrio metálico[30] [25].

La figura 5.25 nos muestra el RDF para los pares Fe-Fe(5.25(a)), Fe-

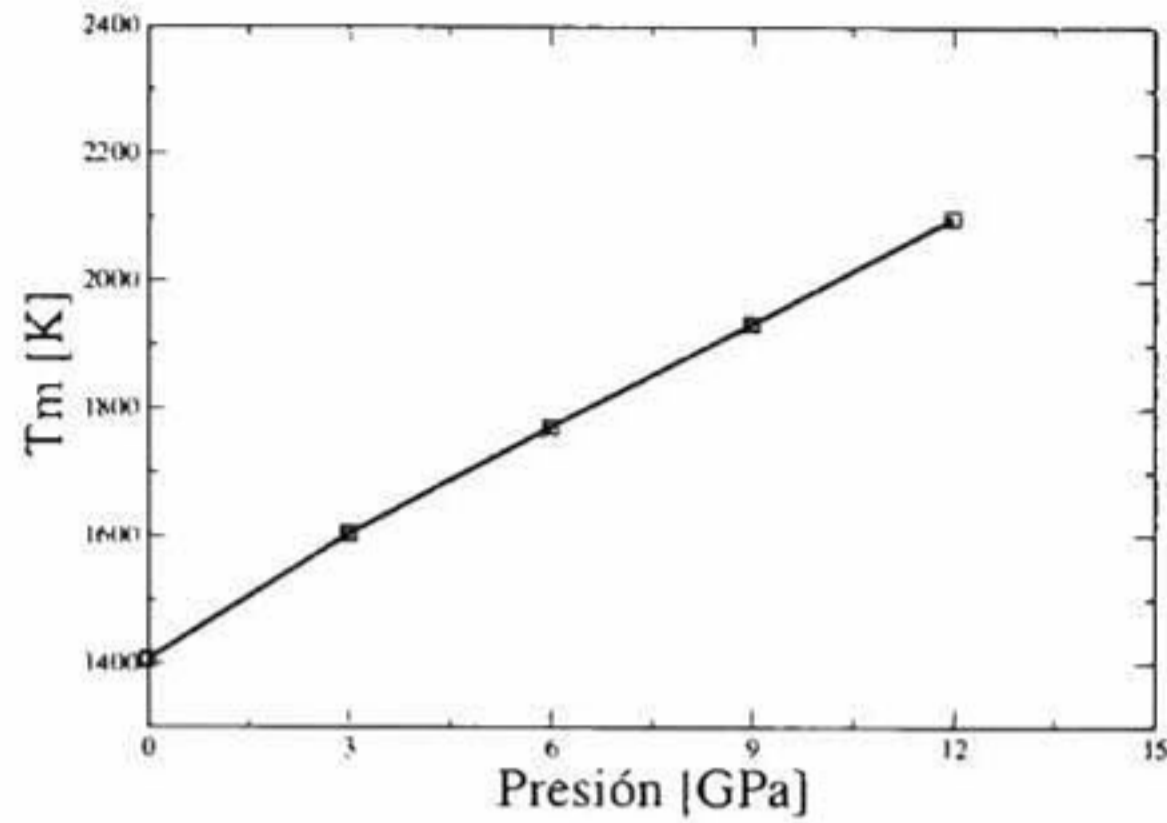


Figura 5.22: Temperatura de fusión como función de la presión

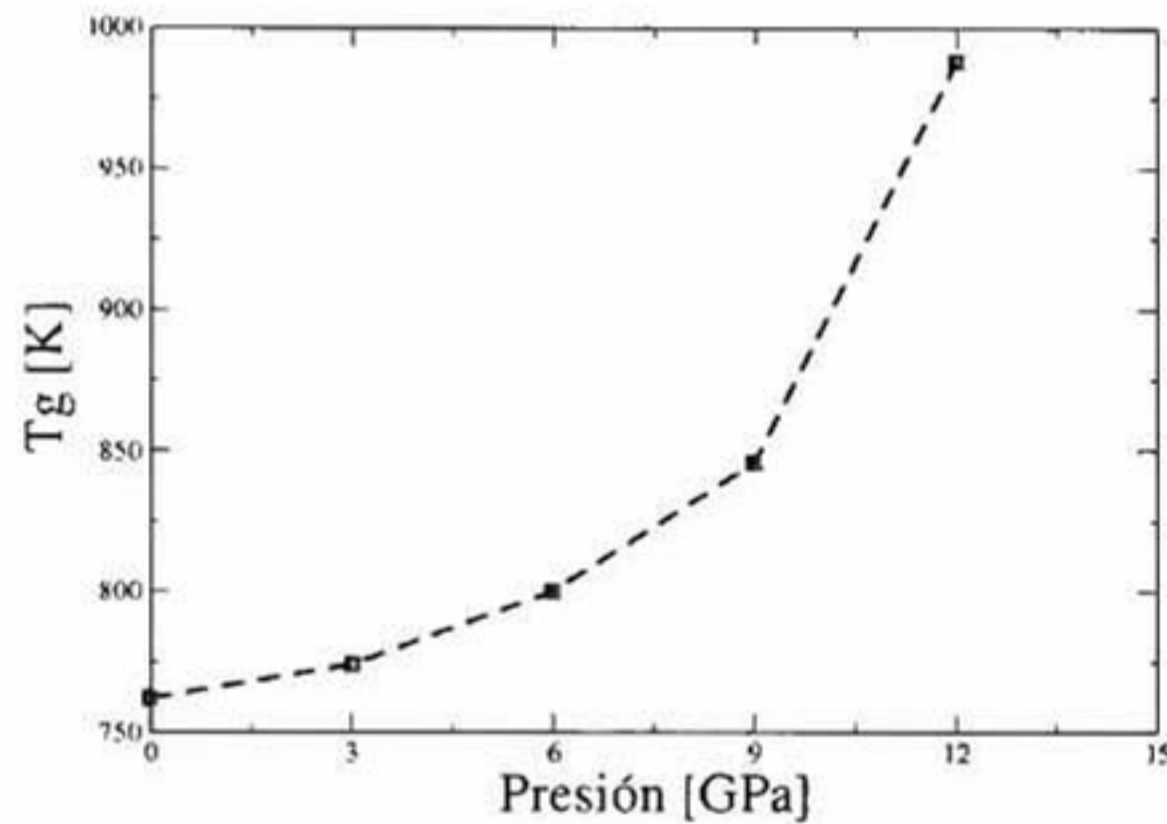


Figura 5.23: Temperatura de transición vítrea como función de la presión

Al(5.25(b)) y Al-Al(5.25(c)) a 0, 6, y 12 GPa respectivamente para el vidrio metálico, apreciamos en la figura 5.25(a) como el primer pico va disminuyendo en función de la presión, esto sugiere el número de vecinos se está disminuyendo. En el RDF de los pares Fe-Al (fig 5.25(b)) observamos la formación de un hombro a 3.1 Å, lo cual nos indica que el orden local entre el Fe-Al está dominado por un enlace fuertemente covalente [25]. La aparición de este hombro fue reportado por Li Hui[25] para la aleación  $Al_{50}Fe_{50}$ . También observamos que conforme aumenta la presión este hombro tiende a desaparecer.

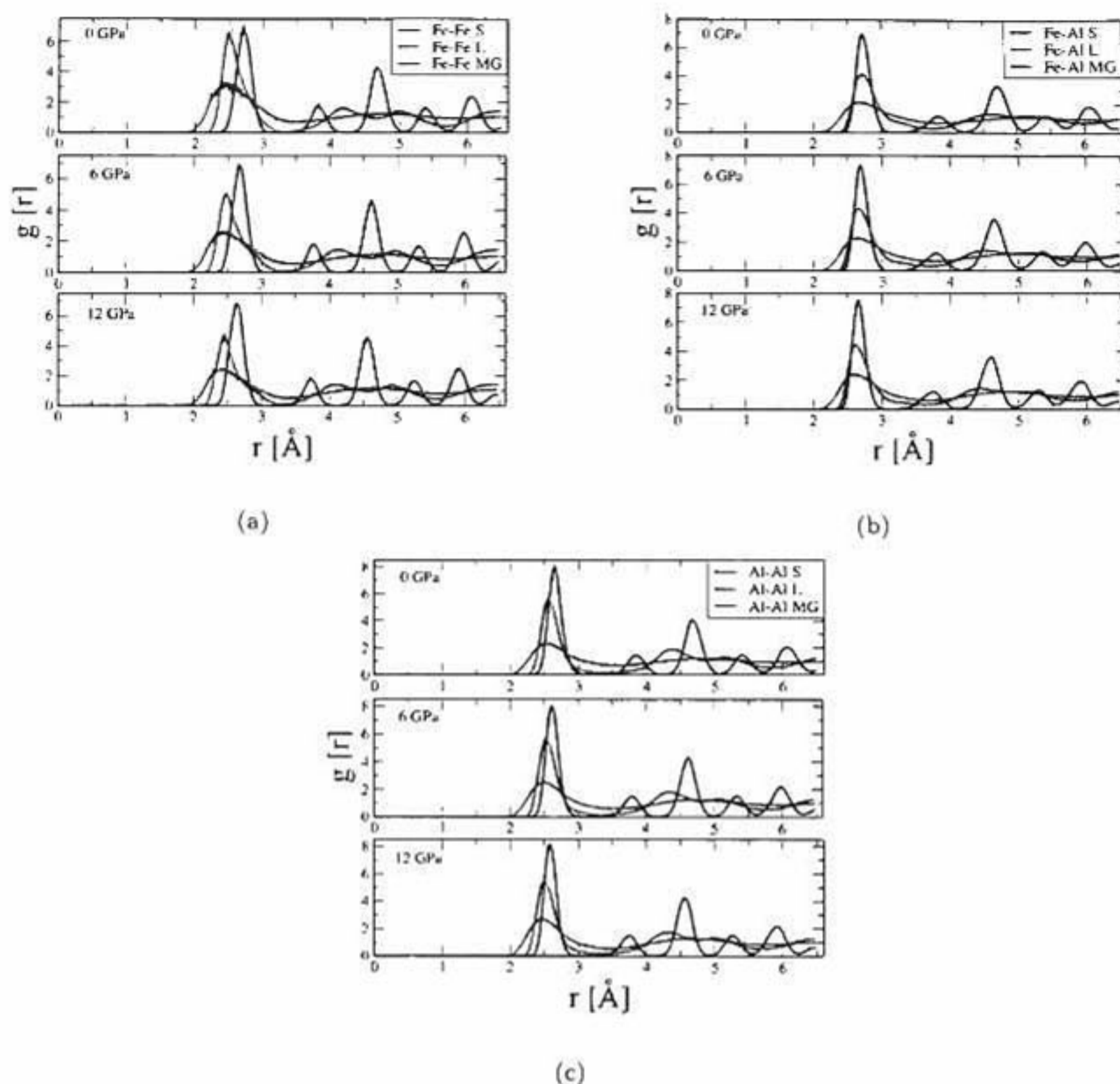


Figura 5.24: Los PRDF parciales a 0, 6 y 12 GPa respectivamente para los pares a) Fe-Fe. b) Al-Fe y c) Al-Al. (S=Sólido 300 K, L=Líquido 2500 K y MG=Vidrio metálico)

Para el mejor entendimiento del comportamiento de la función de distribución radial en el vidrio metálico, se realizó un fiteo el cual se muestra en la figura 5.26. Aquí podemos observar que en el RDF para Fe-Fe el primer pico se subdivide en 2 picos, para Fe-Al en 3 picos y en Al-Al en 2 picos.

En el RDF el primer pico nos indica como es el ordenamiento a corto alcance en el sistema que se tiene, por lo cual en la figura 5.26(a) observamos que el primer pico se subdivide en 2, esto nos sugiere un ordenamiento local a



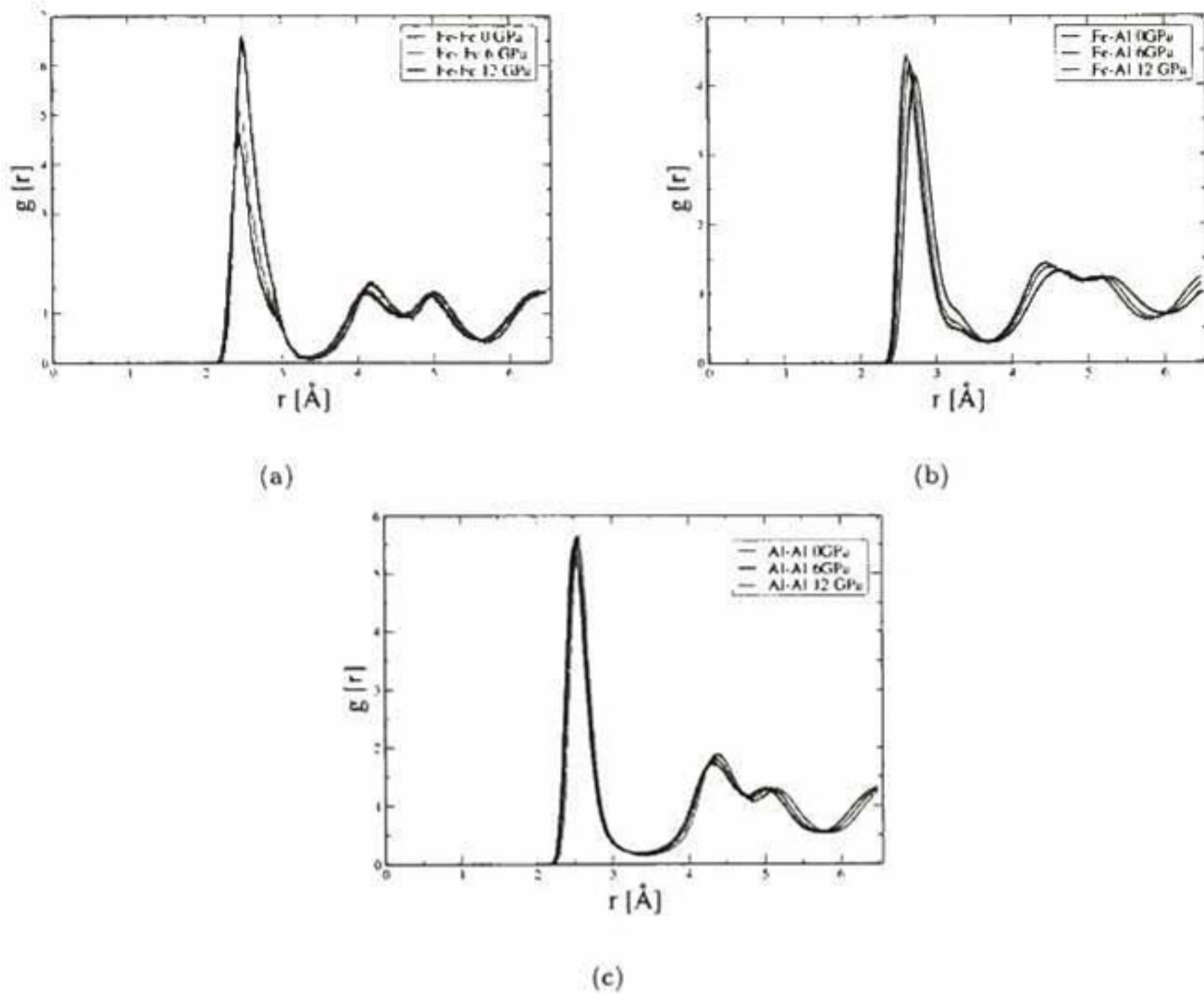


Figura 5.25: Los PRDF parciales para los pares, a) Fe-Fe, b) Al-Fe y c) Al-Al a 0, 6 y 12 GPa respectivamente en el vidrio metálico.

mediano alcance ya que podemos apreciar que con el aumento de la presión el segundo subpico se ensancha lo cual genera la aparición de un hombro. En la gráfica de la parte superior derecha 5.26(a) observamos también que el área de los dos subpicos disminuye como función de la presión. La gráfica 5.26(b) muestra que en la interacción del par Fe-Al el primer pico genera 3 subpicos. La gráfica de la parte superior derecha nos muestra como el tercer subpico disminuye conforme aumenta la presión lo cual nos indica que el hombro que se observa claramente en el RDF a 0 GPa va desapareciendo con la presión lo que nos sugiere que un posible ordenamiento a mediano alcance se pierde con la presión. Mientras que la figura 5.26(b) muestra que el primer pico

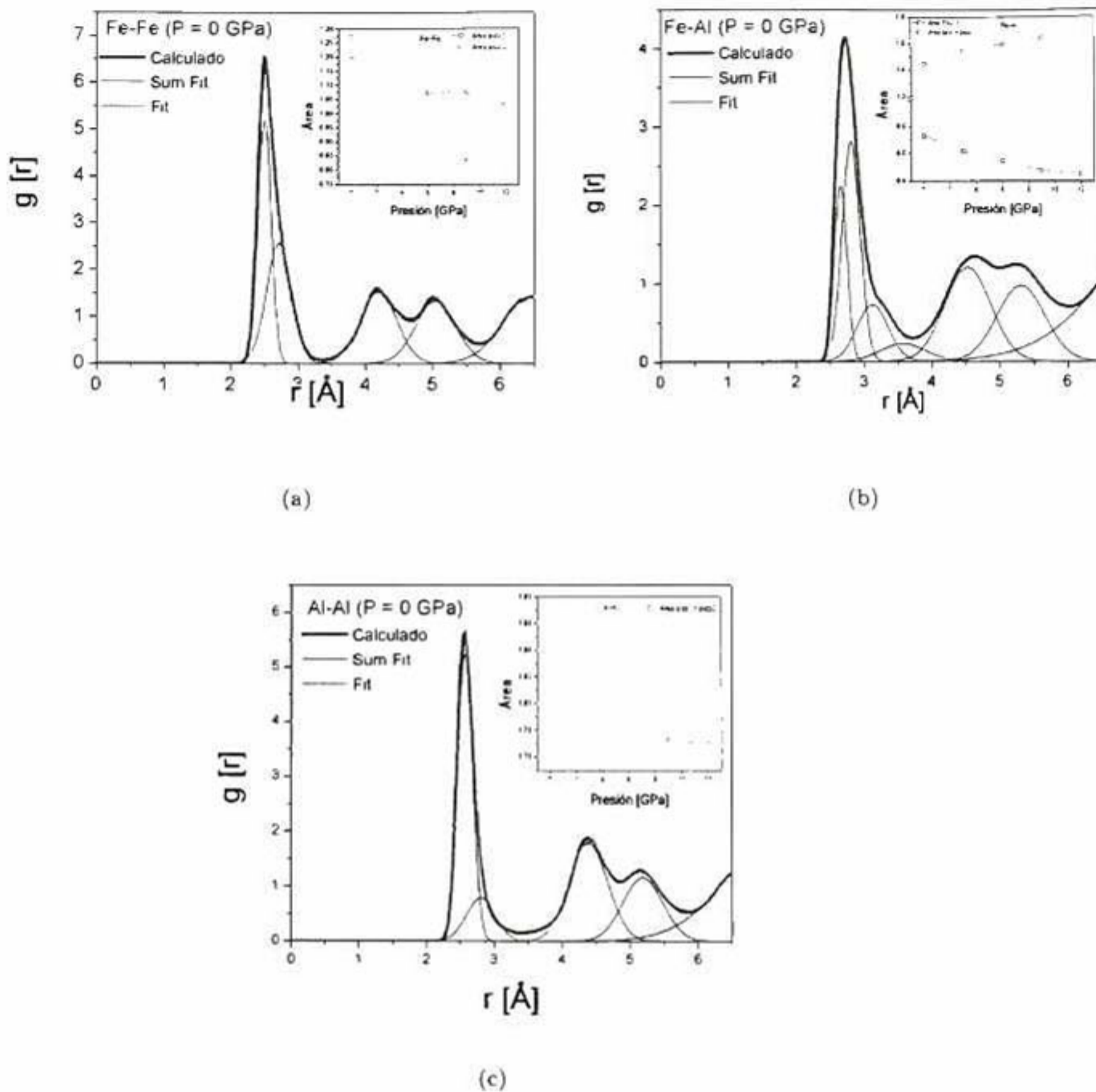
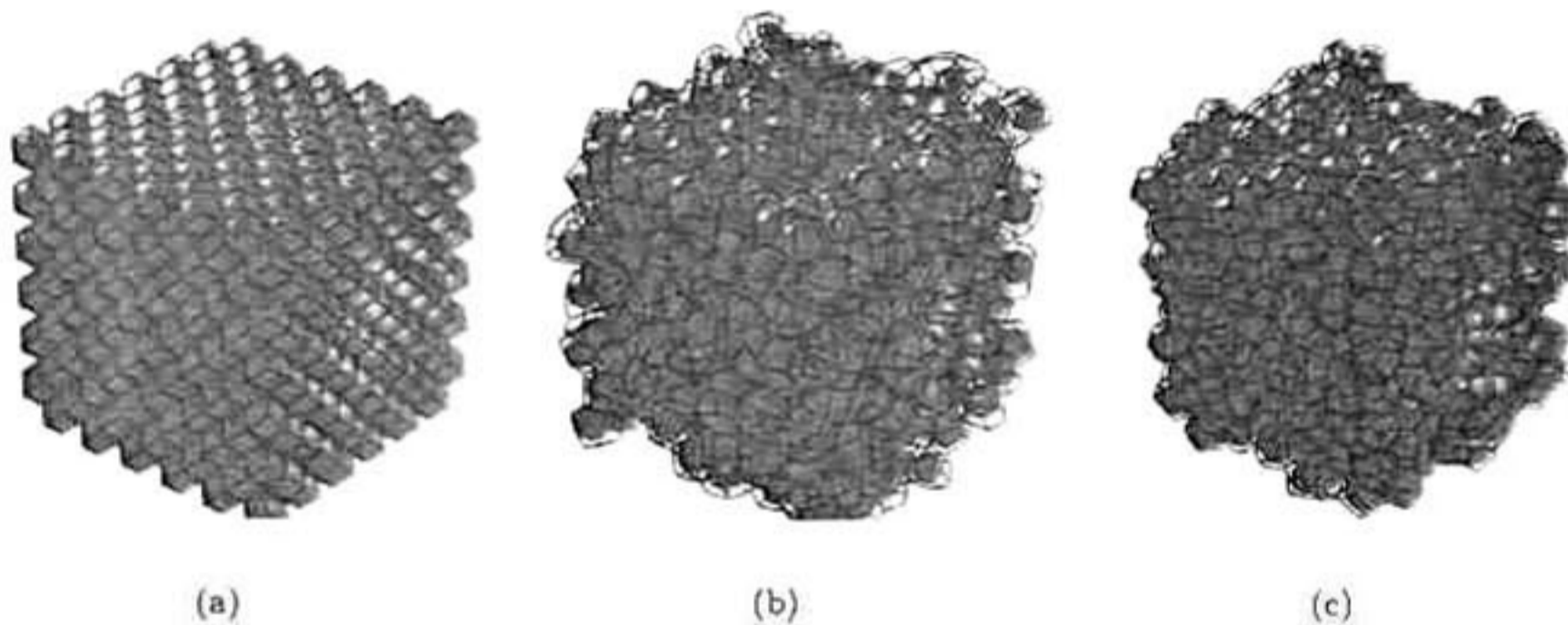


Figura 5.26: Fiteo del rdf para los pares. a) Fe-Fe, b) Al-Fe y c) Al-Al a 0 GPa en el vidrio metálico.

de la interacción de Al-Al forma 2 subpicos pero observamos que tienden a disminuir ligeramente con el aumento de la presión lo cual se observa de manera más clara en la figura de la parte superior derecha. En este pico no se observa un cambio considerable con el aumento de la presión lo que nos sugiere un ordenamiento del par Al-Al.

En este trabajo también pudimos realizar un análisis de la estructura de

esta aleación ( $Al_{75}Fe_{25}$ ) a través de la estadística de poliedros de Voronoi utilizando el software voro++ [23]. La figura 5.27 representa la configuración de los átomos en el sólido, líquido y vidrio metálico. En la figura 5.27(a) se aprecia que el sistema se encuentra completamente ordenado lo cual es característico del sólido, mientras que en la figura 5.27(b) se observa el sistema completamente desordenado característico del líquido, en esta figura se observa espacio libre entre los átomos, el cual ya no se observa en la figura 5.27(c) que corresponde al vidrio metálico.



**Figura 5.27:** Distribución de voronoi para el estado inicial a) sólido a 300 K, b) líquido a 2500 K y c) cuando se forma el vidrio metálico. Se utilizaron 864 átomos.

La figura 5.29 muestra la distribución del número de poliedros como función del volumen para el sistema sólido, líquido y vidrio metálico a diferentes presiones. Las gráficas muestran 2 picos debido a que el primero representa el volumen para los átomos de Hierro y el segundo para los de Aluminio. Se observa que los picos del sólido están completamente bien definidos, el pico del líquido es una gaussiana debido a que los átomos adquieren un desordenamiento, sin embargo los picos que aparecen para el MG es muy similar al del sólido lo que nos sugiere un ordenamiento a corto alcance en los átomos característico de un vidrio metálico. También apreciamos en las figuras

5.29(a), 5.29(b), 5.29(c), 5.29(d) y 5.29(e) como el volumen para el vidrio metálico tiende a disminuir conforme aumentamos la presión, esto debido a que el sistema se está comprimiendo con la aplicación de la presión.

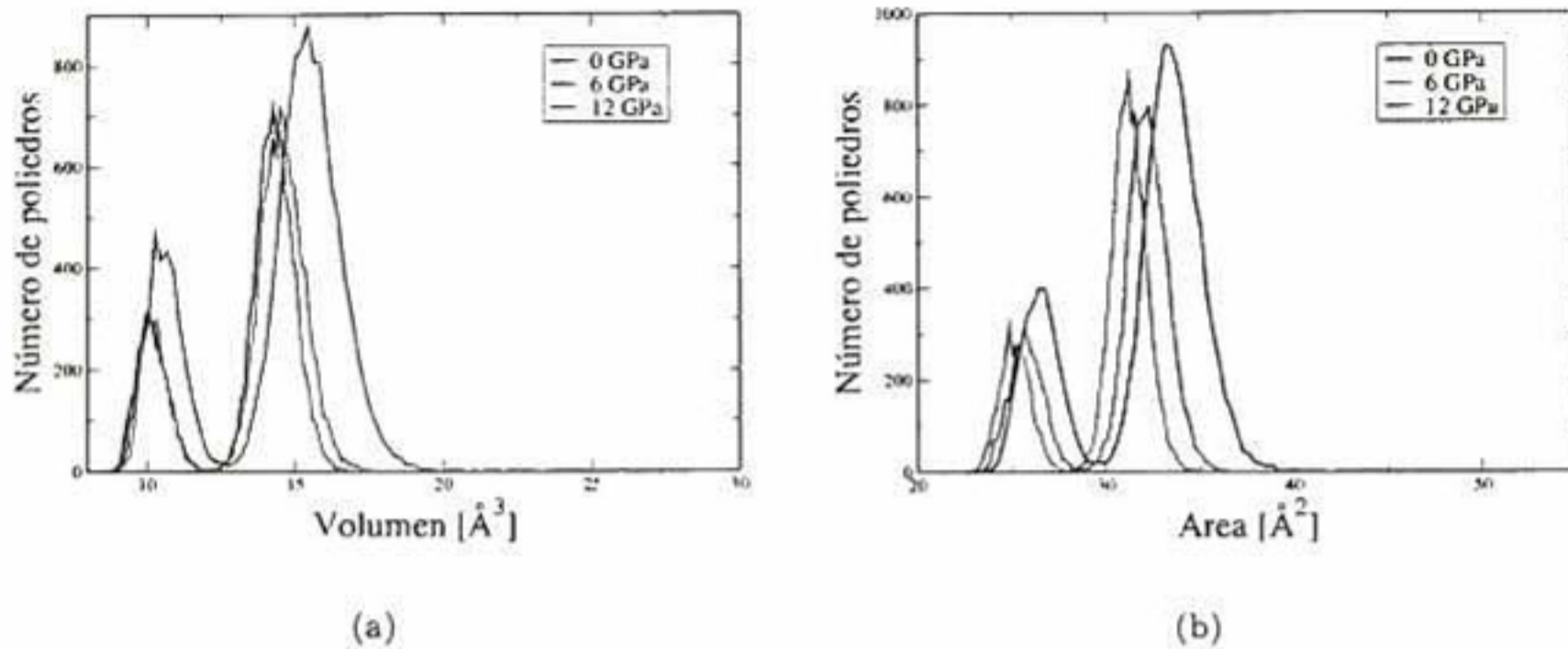


Figura 5.28: Distribución de los poliedros de Voronoi como función de a) el volumen, b) el área. Para el vidrio metálico a 0, 6 y 12 GPa.

Esto se puede observar mejor en la figura 5.28(a) donde claramente se aprecia la disminución del volumen en función de la presión, lo mismo sucede en el comportamiento del área como función del número de poliedros (fig 5.28(b)).

El análisis que se realizó anteriormente para el RDF y para la estadística de voronoi nos llevan a la conclusión de que con el aumento de la presión la estructura del vidrio metálico pierde volumen libre, lo que nos sugiere un empaquetamiento en la estructura.

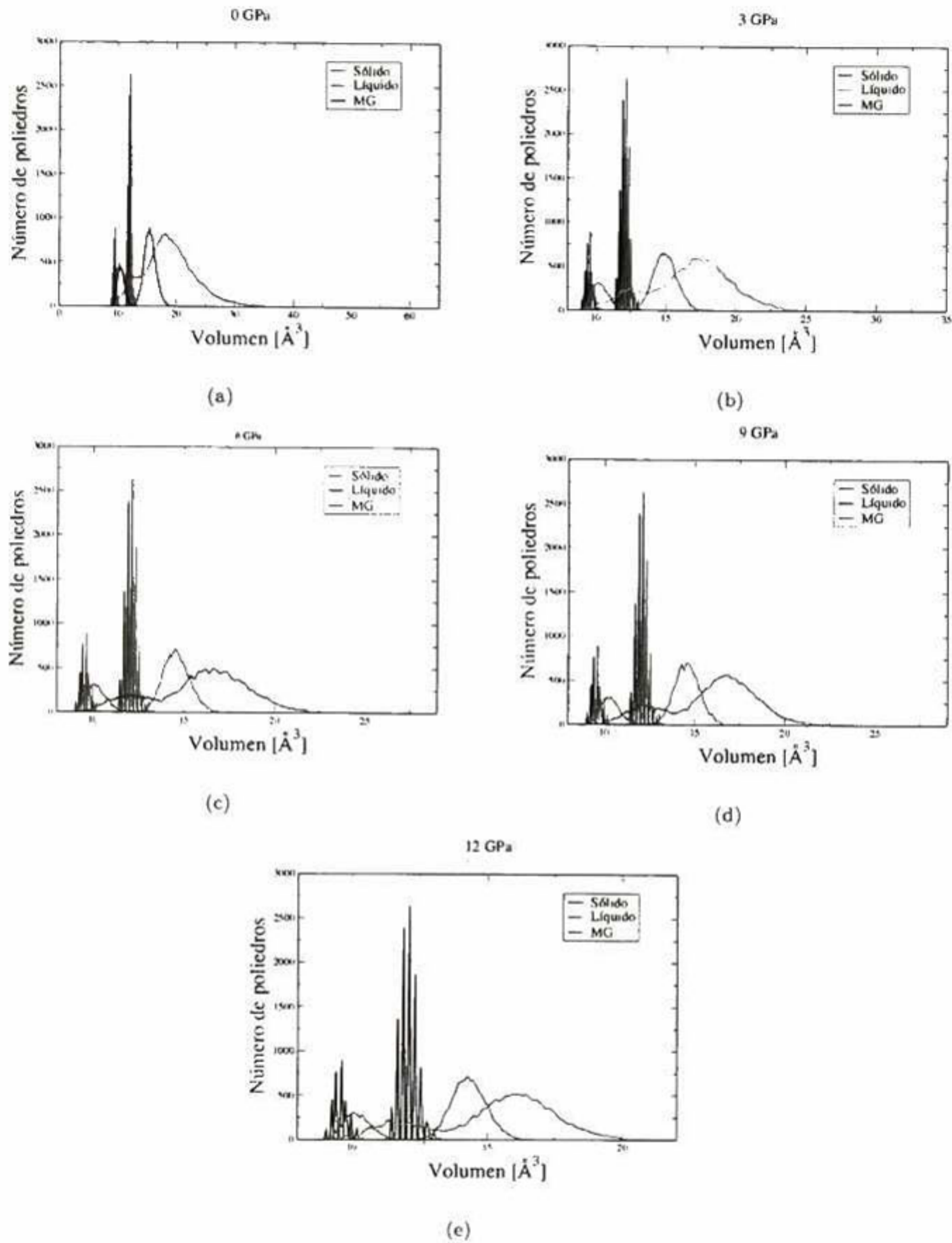


Figura 5.29: Número de poliedros como función del volumen del sólido, líquido y MG a) 0GPa b) 3GPa c) 6GPa d) 9GPa e) 12GPa .



## CAPÍTULO 6

---

### Conclusiones

---

- En este trabajo se realizaron cálculos de dinámica molecular clásica para encontrar las temperaturas de fusión ( $T_m$ ) de Al, así como para la aleación  $Al_3Fe$ . Se uso el método de co-existencia de dos fases para llevar a cabo estos cálculos.
- Para el calculo de  $T_m$  de Al se usaron 2 potenciales diferentes: el EAM y el EAM/FS. Siendo el EAM,  $T_m$  es cercana a 1100 K, estando esta 166.5 K por encima de la experimental (933.5 K) es decir 17.8 % de error, mientras que usando el EAM/FS es cercana a 950 K la cual esta en buen acuerdo con la experimental con solo un 1.7 % de error. Demostrando la dependencia de las propiedades dinámicas con el potencial.
- Para la aleación  $Al_3Fe$  se encontró que  $T_m$  es cercana a 1450 K. la cual esta en buen acuerdo con la experimental (1430.15 K), correspondiente al 1.3 % de error. Esto y otros observables dan confiabilidad al potencial.

- El cálculo de temperaturas de fusión utilizando el potencial EAM para el Al sugiere la necesidad de una nueva reparametrización en aras de obtener mejores resultados que estén más cercanos a los obtenidos de manera experimental.
- Usando el potencial EAM/FS se obtuvieron mejores resultados debido a que las funciones usadas para la parametrización son diferentes.
- Se realizaron cálculos de dinámica molecular clásica para modelar la formación de vidrios metálicos como función de la presión, en este caso particular se modeló la aleación  $Al_{75}Fe_{25}$ .
- Se obtuvieron las temperaturas de fusión, así como las de transición vítrea como función de la presión. Se predice un comportamiento lineal para  $T_m$  y uno exponencial para  $T_g$ .
- Se realizó una caracterización estructural por medio de RDF y estadística de Voronoi como función de la presión. Los resultados nos sugieren que con el aumento de la presión la estructura del vidrio metálico pierde volumen libre, lo que nos indica un incremento de empaquetamiento en la estructura con una dependencia no lineal.
- El análisis de la función de distribución radial en función de la presión para el par Fe-Fe nos sugiere un ordenamiento a mediano alcance debido al ensanchamiento del primer pico como función de la presión.
- Para el par Fe-Al la desaparición del hombro (3.1 Å) sugiere que un posible ordenamiento a mediano alcance se pierde conforme aumenta la presión.



---

## Apendice A: Mecánica Estadística

---

La mecánica estadística tiene por objetivo derivar las propiedades al equilibrio de sistemas macroscópicos desde las leyes de la dinámica molecular. Se considerará un sistema aislado con la finalidad de tener a la energía como una constante de movimiento, esto obviamente es una idealización ya que en el laboratorio no se tratan sistemas aislados sino, que algunas veces se necesita que haya interacción entre los sistemas y el mundo externo. Si se encuentra que estas interacciones son lo suficientemente débiles entonces, la energía del sistema será aproximadamente constante por lo cual podemos considerar al sistema como aislado. El estado de un sistema es completa y únicamente definido por  $3N$  coordenadas canónicas  $q_1, q_2, \dots, q_{3N}$  además de  $3N$  momentos canónicos  $p_1, p_2, \dots, p_{3N}$ . Estas  $6N$  variables son denotadas colectivamente como  $(q, p)$ . La dinámica de un sistema está determinado por el Hamiltoniano  $\mathcal{H}(p, q)$ , por lo que se encontrará que las ecuaciones canónicas de movimiento están dadas de la siguiente forma

$$\frac{\partial \mathcal{H}(p, q)}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}(p, q)}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad (2)$$

## .1. Postulado de igual probabilidad a priori

El postulado de igual probabilidad a priori dice que cuando un sistema macroscópico en equilibrio termodinámico, un estado es igualmente probable a cualquier estado satisfaciendo las condiciones macroscópicas del sistema. Esto implica que en equilibrio termodinámico el sistema a consideración se encuentra en un ensamble llamado *ensamble microcanónico* que tiene una función de densidad definida de la siguiente manera:

$$\rho(p, q) = \begin{cases} \text{Constante} & \text{si } E < \mathcal{H}(p, q) < E + \Delta \\ 0 & \text{si otra} \end{cases}$$

Esto quiere decir que todas las partículas contenidas en el ensamble tendrán el mismo número de partículas  $N$  y el mismo volumen  $V$ . Aquí se pueden introducir dos tipos de promedios, uno es el valor más probable y otro es el ensamble promedio. El valor más probable de  $f(p, q)$  es el que posee el número más grande de sistemas en el ensamble, mientras que el ensamble promedio de  $f(p, q)$  está definido por

$$\langle f \rangle = \frac{\int d^{3N}p d^{3N}q f(p, q) \rho(p, q)}{\int d^{3N}p d^{3N}q \rho(p, q)} \quad (3)$$

El ensamble promedio y el valor más probable son casi iguales, si la raíz cuadrada de la fluctuación es pequeño, es decir

$$\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{\langle f \rangle^2} \ll 1 \quad (4)$$

## 2. Ensamble microcanónico

Un ensamble microcanónico es caracterizado por que el sistema va a tener  $N$  partículas, un volumen  $V$  y su energía entre  $E$  y  $E + \Delta$ , aquí el promedio del momento total del sistema es cero [24]. Nosotros podemos hacer una conexión entre el ensamble microcanónico y la termodinámica, esto con la ayuda del concepto de entropía. Se han conectado la entropía con el número de microestados posibles  $\Omega$  por la siguiente relación  $(E, V, N), S \propto \ln \Omega$  [19]. *Un microestado es un estado del sistema en el que todas las variables microscópicas de interés están especificadas. Dado el elevado número de éstas, en general un microestado no es accesible experimentalmente. Mientras que un macroestado está definido como el estado del sistema que observamos experimentalmente, definido por un número pequeño de variables macroscópicas. Es el estado termodinámico del sistema [41].*

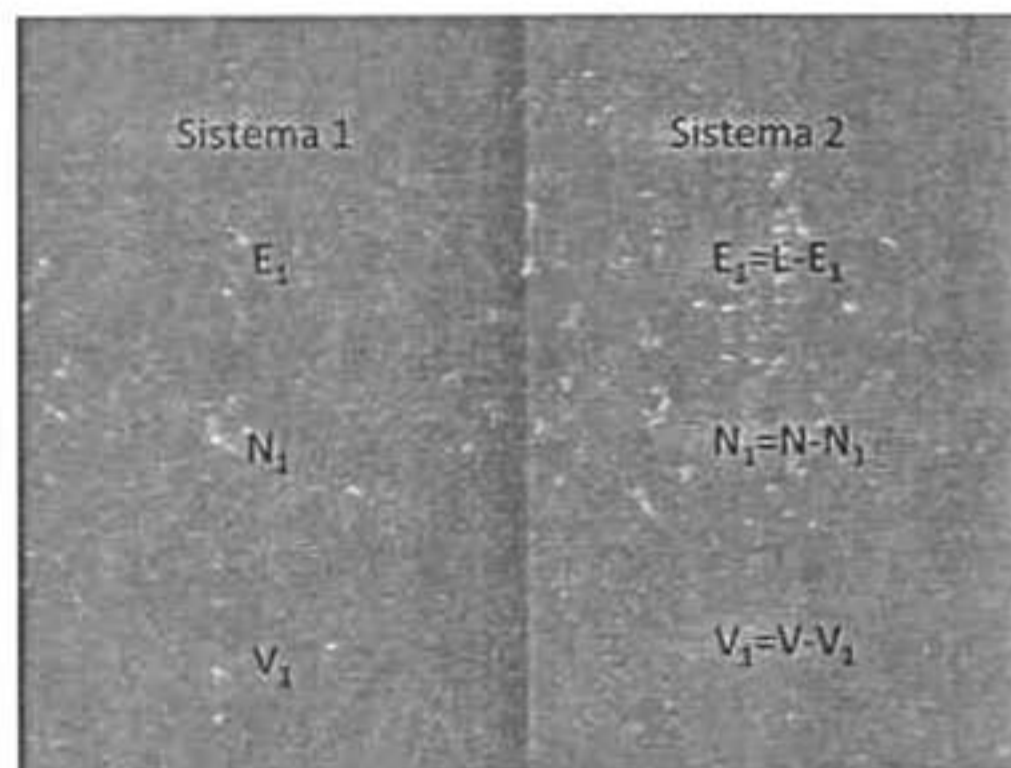


Figura 1: Sistemas en equilibrio termodinámico

Si nosotros tenemos 2 sistemas en equilibrio termodinámico el número de microestados  $\Omega(E_1, V_1, N_1, E_2, V_2, N_2)$  es máximo respecto a cualquiera de las variables termodinámicas de uno de los dos sistemas [41]. Por lo

que si tenemos dos sistemas aislados pero en equilibrio los macroestados del sistema 1 van a ser  $E_1, V_1, N_1$  mientras que sus microestados serían  $\Omega_1(E_1, V_1, N_1)$ . Para el sistema 2 los macroestados son  $E_2, V_2, N_2$  y sus microestados  $\Omega_2(E_2, V_2, N_2)$ . El sistema total también está aislado por lo que su energía total es  $E = E_1 + E_2$ , el volumen  $V = V_1 + V_2$  y el número de partículas es  $N = N_1 + N_2$ , ahora el número posible de microestados está dado como:

$$\Omega(E, V, N; E_1, V_1, N_1) = \Omega_1(E_1, V_1, N_1; E_2, V_2, N_2) \quad (5)$$

Si se pone en contacto los sistemas 1 y 2 y se deja que el sistema intercambie energía, volumen y número de partículas, el los microestados evolucionan con el tiempo hasta que se establece una nueva situación de equilibrio termodinámico entre los dos sistemas. Esto se cumple cuando el número de microestados es máximo.

La forma en que los 2 sistemas puestos en contacto llegan al equilibrio va a depender del tipo de pared que los separa; por ejemplo si se tienen una pared diatérmica, rígida e impermeable las energías  $E_1$  y  $E_2$  van a ser variables debido a que hay intercambio de calor, sin embargo  $N_1, N_2, V_1, V_2$  estarán fijos, entonces  $E = E_1 + E_2$  y los microestados están solo en función de la energía de acuerdo a la siguiente ecuación

$$\Omega(E; E_1) = \Omega_1(E_1)\Omega_2(E - E_1) \quad (6)$$

Si ahora buscamos que se cumpla que el número de microestados sea máximo tendremos

$$\left. \frac{d\Omega}{dE_1} \right|_{\bar{E}_1} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{1}{\Omega_1} \left( \frac{\partial \Omega_1}{\partial E_1} \right) = \frac{1}{\Omega_2} \left( \frac{\partial \Omega_2}{\partial E_2} \right) \quad (8)$$

A partir de esto podemos decir que desde el punto de vista de mecánica estadística, el equilibrio térmico entre dos sistemas se encuentra cuando:

$$\left( \frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial E_1} \right)_{V_1, N_1} = \left( \frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2} \right)_{V_2, N_2} \quad (9)$$

Desde el punto de vista termodinámico el equilibrio térmico se encuentra cuando las temperaturas de ambos sistemas son iguales

$$T_1 = T_2 \quad (10)$$

Otro caso que podemos encontrar es cuando se tiene una pared diatérmica, móvil e impermeable al paso de las partículas; aquí tendremos que  $E_1, E_2, V_1, V_2$  son variables mientras que  $N_1$  y  $N_2$  son fijos, por lo que ahora tenemos que:

$$\left. \frac{\partial \Omega}{\partial E_1} \right|_{\bar{E}_1, \bar{V}_1} = 0 \quad \left. \frac{\partial \Omega}{\partial V_1} \right|_{\bar{E}_1, \bar{V}_1} = 0 \quad (11)$$

A partir de esto concluimos que se tienen 2 condiciones de equilibrio las cuales podemos representar por medio de la siguiente ecuación

$$\left( \frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial V_1} \right)_{E_1, N_1} = \left( \frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2} \right)_{E_2, N_2} \quad (12)$$

Por lo que las condiciones de equilibrio térmico y mecánico son:

$$T_1 = T_2 \quad P_1 = P_2 \quad (13)$$

Otro caso que se puede presentar en el ensamble microcanónico es donde tengamos una pared diatérmica, móvil y permeable al paso de las partículas, por lo cual ahora tendremos que  $E_1, E_2, V_1, V_2, N_1, N_2$  son variables, por lo tanto tenemos que los microestados son:

$$\Omega(E, V, N; E_1, V_1, N_1) = \Omega_1(E_1, V_1, N_1)\Omega_2(E - E_1, V - V_1, N - N_1) \quad (14)$$

Por lo que teniendo en cuenta la condición de que el número de microestados debe de ser el máximo tenemos que:

$$\left( \frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial N_1} \right)_{E_1, V_1} = \left( \frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial N_2} \right)_{E_2, V_2} \quad (15)$$

En este caso tenemos que el equilibrio en termodinámica debe de corresponder a un equilibrio térmico, mecánico y químico por lo cual se debe de cumplir que:

$$T_1 = T_2 \quad P_1 = P_2 \quad \mu_1 = \mu_2 \quad (16)$$

Del análisis anterior podemos concluir que para un sistema aislado en equilibrio termodinámico que tiene un macroestado  $(E, V, N)$  la entropía  $S$  y  $\ln \Omega$  son proporcionales por lo cual tenemos que:

$$S(E, V, N) = K_B \ln \Omega(N, V, T) \quad (17)$$

Donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann la cual en el SI tiene un valor de  $1.38066 \times 10^{-23} \text{J/K}$  [41].

### .3. Ensemble Canónico

Un ensemble canónico es aquel en el cual el sistema a estudiar se encuentra en equilibrio térmico con baño externo a una temperatura  $T$ , el sistema también tiene que estar a la temperatura  $T$ . En este ensemble tomamos un sistema que contiene un subsistema, el sistema mayor va a actuar como un baño térmico mientras que el subsistema puede intercambiar energía con el baño, es decir sus paredes son diatermas.  $E_0$  es la energía del sistema completo.

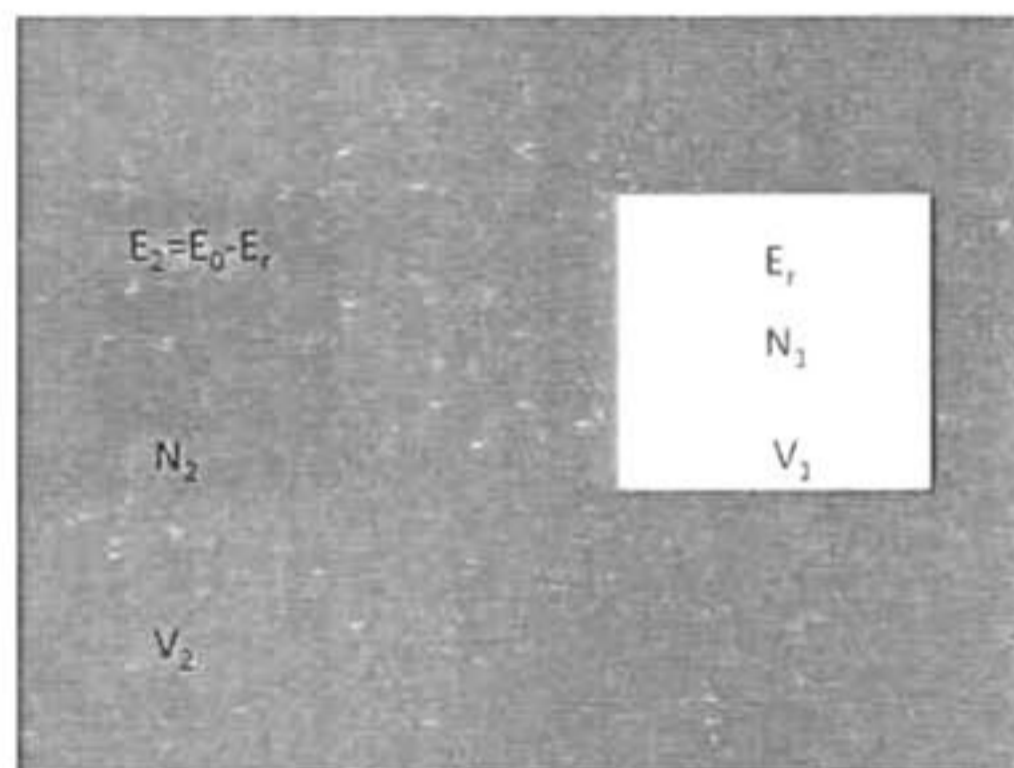


Figura 2: Subsistema en un baño térmico

Ahora la probabilidad de que el subsistema tenga una energía  $E_r$  estará en función de los microestados de todo el sistema, por lo que tendremos:

$$P(E_r) = C\Omega_1(E_r)\Omega_2(E_0 - E_r) = C\Omega_1(E_r)e^{S_2/k_B} \quad (18)$$

Supongamos que  $E_r \ll E_0$  entonces temos que

$$S_2(E_0 - E_r) = S_2(E_0) - \left. \frac{\partial S_2}{\partial E} \right|_{E_0} E_r + \dots = S_2(E_0) - \frac{E_r}{T} + \dots \quad (19)$$

Sustituyendo tenemos que la probabilidad de que el sistema tenga una energía  $E_r$  es

$$P(E_r) = \frac{\Omega_1(E_r)e^{-\beta E_r}}{Z} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (20)$$

Donde  $\Omega_1(E_1)$  es la degeneración del nivel de energía  $E_r$ , es decir el número de estados con dicha energía. Si consideramos que la probabilidad  $P(E_r)$  y  $Z$  son determinados por normalización obtenemos que

$$Z(T, V, N) = \sum_{E_r} \Omega_1(E_r)e^{-\beta E_r} \quad (21)$$

Ahora si en vez de hacer la sumatoria sobre  $E_r$  y sumamos sobre los estados  $r$  tenemos que

$$Z(T, V, N) = \sum_r e^{-\beta E_r} \quad (22)$$

Esta función  $Z$  es llamada función de partición; esta función nos será de gran utilidad para calcular las propiedades termodinámicas del sistema. Para



encontrar estas propiedades también es necesario definir el potencial termodinámico, el cual debe ser el adecuado para el sistema en equilibrio con un baño térmico, en este caso es la energía libre de Helmholtz  $F(N, V, T)$ , el cual se relaciona con la función de partición de la siguiente forma:

$$F(N, V, T) = -k_B T \ln Z(N, V, T) \quad (23)$$

Apartir de esta relación podemos obtener las siguientes cantidades termodinámicas

$$P = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, N} \quad S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N} \quad \mu = - \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, V} \quad (24)$$



---

## Bibliografía

---

- [1] Hans C. Andersen. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *The Journal of Chemical Physics*, 72(4):2384, 1980.
- [2] O N Bedoya-Martínez, M Kaczmarek, and E R Hernández. Melting temperature of fcc metals using empirical potentials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18(34):8049–8062. August 2006.
- [3] V. A. Borodin. Local atomic arrangements in polytetrahedral materials ii. coordination polyhedra with 14 and 15 atoms. *Philosophical Magazine A*. 79(10):1887–1907, October 1999.
- [4] Witold Brostow, Jean-Pierre Dussault, and Bennett L Fox. Construction of voronoi polyhedra. *Journal of Computational Physics*, 29(1):81–92, October 1978.
- [5] R. Busch, J Schroers, and W. H. Wang. Thermodynamics and kinetics of bulk metallic glass thermodynamics of supercooled. *MRS Bulletin*, 32(August):620–623, 2007.

- [6] J Cai and Y. Y. Ye. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys. *Physical review. B, Condensed matter*, 54(12):8398–8410, September 1996.
- [7] Kuiing Chen, Hongbo Liu, Xiaoping Li, Qiyong Han, and Zhuangqi Hu. Molecular dynamics simulation of local structure of aluminium and copper in supercooled liquid and solid state by using EAM. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 7:2379–2394, 1995.
- [8] J Cheney and K Vecchio. Development of quaternary fe-based bulk metallic glasses. *Materials Science and Engineering: A*, 492(1-2):230–235, September 2008.
- [9] Y.Q. Cheng and E. Ma. Atomic-level structure and structure–property relationship in metallic glasses. *Progress in Materials Science*, 56(4):379–473, May 2011.
- [10] Fabrizio Cleri and Vittorio Rosato. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*, 48:22–33, 1993.
- [11] Murray Daw and M. Baskes. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 29(12):6443–6453, June 1984.
- [12] Gang Duan, Donghua Xu, Qing Zhang, Guoyun Zhang, Tahir Cagin, William Johnson, and William Goddard. Molecular dynamics study of the binary cu<sub>46</sub>zr<sub>54</sub> metallic glass motivated by experiments: Glass formation and atomic-level structure. *Physical Review B*, 71(22):1–9, June 2005.
- [13] M. W Finnis and J.E Sinclair. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philos. Mag. A*, 50:45–55, 1984.

- [14] S. M. Foiles, M. I. Baskes, and S. Daw. Embedded-atom-method functions of the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and thier alloys. *Physical Review B*, 33:7983–7991, 1986.
- [15] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding Molecular simulation from algorithms to applications*. Academic Press, 2002.
- [16] B Gelchinski, a Mirzoev, Y Mitrohin, and E Dyuldina. Simulation of atomic and electronic structure of liquid caesium by method of the first-principal molecular dynamics. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 353(32-40):3480–3483, October 2007.
- [17] A L Greer and Guest Editors. Bulk metallic glasses : At the cutting edge of. *MRS Bulletin*, 32(August):611–619, 2007.
- [18] A. Lindsay Greer. Metallic glasses. *Science*, 267:1947–1953, February 207.
- [19] W Greiner, L Neise, and Stöcker. *Termodinamics and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag, 1995.
- [20] J. M. Haile and S. Gupta. Extensions of the molecular dynamics simulation method. ii. isothermal systems. *The Journal of Chemical Physics*, 79(6):3067, 1983.
- [21] William G Hoover. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, 31(3):1695–1697, 1985.
- [22] <http://lammmps.sandia.gov/>, Oct 2011.
- [23] <http://math.lbl.gov/voro++/>, Oct 2011.
- [24] K Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley Sons, 1987.

- [25] Li Hui. Shoulder-peak formation in the process of quenching. *Physical Review B*, 68(2):1–5, July 2003.
- [26] Akihisa Inoue. Stabilization of metallic supercooled liquid and bulk amorphous alloys. *Acta Materialia*, 48(1):279–306, January 2000.
- [27] Akihisa Inoue and Nobuyuki Nishiyama. New Bulk Metallic Glasses for. *MRS Bulletin*, 32(August):651–658, 2007.
- [28] ASM International and Guest Editors. *Volume 3: Alloy phase diagrams*. ASM international, 1992.
- [29] R. A. Johnson. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals. *Physical Review B*, 37:3924–3931, 1988.
- [30] Su-Wen Kao, Chi-Chuan Hwang, and Tsung-Shune Chin. Simulation of reduced glass transition temperature of CuZr alloys by molecular dynamics. *Journal of Applied Physics*, 105(6):064913, 2009.
- [31] Y J Kim, R Busch, and W L Johnson. Experimental determination of a time-temperature-transformation diagram containerless electrostatic levitation processing technique. *Applied Physics Letters*, 68(February):1057–1059, 1996.
- [32] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. John Wiley Sons, Inc, 2005.
- [33] Y Li, S. P. Poon, J. G. Shiflet, J. Xu, Kim D. H., and Löffler J.F. Formation of bulk metallic glasses and their composites. *MRS Bulletin*, 32(August):624–628, 2007.

- [34] Glenn J. Martyna, Douglas J. Tobias, and Michael L. Klein. Constant pressure molecular dynamics algorithms. *The Journal of Chemical Physics*, 101(5):4177, 1994.
- [35] J Mei and Davenport J.W. Free-energy calculations and the melting point of Al. *Physical Review B*, 46:21–25, 1992.
- [36] M. I. Mendeleev, D. J. Sordelet, and M. J. Kramer. Using atomistic computer simulations to analyze x-ray diffraction data from metallic glasses. *Journal of Applied Physics*, 102(4):043501, 2007.
- [37] M. I Mendeleev and D. J Srolovitz. Effect of fe segregation on the migration of a non-symmetric sigma-5 tilt grain boundary in al. *J. Mater. Res.*, 20(1):208–218, January 2005.
- [38] M.I. Mendeleev, M.J. Kramer, C.a. Becker, and M. Asta. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu. *Philosophical Magazine*, 88(12):1723–1750, April 2008.
- [39] Jr Morris, Cz Wang, Km Ho, and Ct Chan. Melting line of aluminum from simulations of coexisting phases. *Physical review. B, Condensed matter*, 49(5):3109–3115, February 1994.
- [40] Shuichi Nose. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of Chemical Physics*, 81(1):511, 1984.
- [41] J Ortín and r Sanche. *Curso de física estadística*. EBe, 2006.

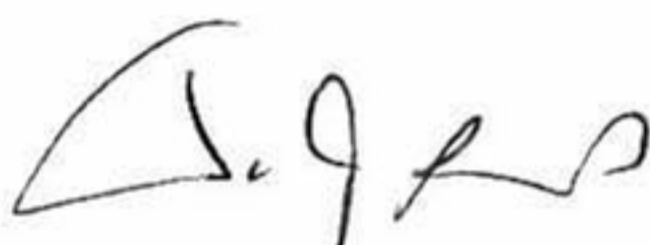
- [42] A. Paduraru, A. Kenoufi, N. P. Bailey, and J. Schiøtz. An Interatomic Potential for Studying CuZr Bulk Metallic Glasses. *Advanced Engineering Materials*, 9(6):505–508, June 2007.
- [43] S. Joseph Poon, Gary J. Shiflet, F. Q. Guo, and V. Ponnambalam. Glass formability of ferrous-and aluminum-based structural metallic alloys. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 317(1-2):1–9, March 2003.
- [44] M. J. Stott and E. E. Zaremba. Quasiatoms: An approach to atoms in nonuniform electronic systems. *Physical Review B*, 22:1564–1583, 1980.
- [45] A. Takeuchi, K. Yubuta, A. Makino, and A. Inoue. Evaluation of glass-forming ability of binary metallic glasses with liquidus temperature, crystallographic data from binary phase diagrams and molecular dynamics simulations. *Journal of Alloys and Compounds*, 483(1-2):102–106, August 2009.
- [46] Jiangting Wang, Peter Damian Hodgson, Jingde Zhang, Wenyi Yan, and Chunhui Yang. Effects of quenching rate on amorphous structures of Cu<sub>46</sub>Zr<sub>54</sub> metallic glass. *Journal of Materials Processing Technology*, 209(9):4601–4606, May 2009.
- [47] Y Wang, J Wu, Q Wang, J Qiang, and C Dong. The bulk metallic glass formation in ZrAlNiTi quaternary system. *Materials Letters*, 61(10):2066–2070, April 2007.
- [48] A. R Yavari, J. J. Lewandoski, and J. Ercket. Mechanical properties of bulk metallic glasses. *MRS Bulletin*, 32:635–638, October 2007.



EL JURADO DESIGNADO POR LA UNIDAD QUERÉTARO DEL CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL, APROBÓ LA TESIS DE MAESTRÍA DEL (LA) C. IRAIS VALENCIA JAIME TITULADA: "FORMACION DE VIDRIOS METALICOS COMO FUNCION DE LA PRESION EN  $Al_3Fe$  POR METODOS TEORICOS", FIRMAN AL CALCE DE COMÚN ACUERDO LOS INTEGRANTES DE DICHO JURADO, EN LA CIUDAD DE QUERÉTARO, QRO., A LOS TRECE DIAS DE ENERO DEL 2012.



Dr. ALDO HUMBERTO ROMERO CASTRO



Dr. FRANCISCO JAVIER ESPINOZA BELTRAN



Dr. JUAN FRANCISCO PEREZ ROBLES



CINVESTAV - IPN  
Biblioteca Central



SSIT0010819