Simulación de Propiedades Mecánicas de Carbono Amorfo

Daniel Castillo[1] **and Rafael I. González**[2,3]

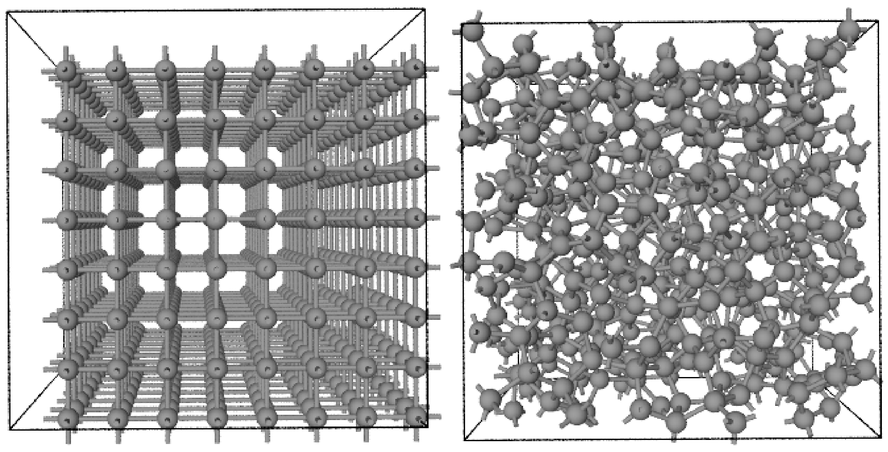
[1]Centro de Óptica e Información Cuántica, Universidad Mayor, Santiago, Chile.
[2]Centro de Nanotecnología Aplicada, Universidad Mayor, Santiago, Chile.
[2]Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, CEDENNA, Santiago, Chile.
daniel.castilloca, rafael.gonzalezvaldes(@mayor.cl)

Introducción

- La realización de centros de color en carbono amorfo, material que tiene una estructura química entre grafito y diamante, ha generado un gran interés de investigación reciente.
- Se ha demostrado una relación directa entre procesos de Información Cuántica y de Termodinámica Cuántica. En principio porque ambas teorías comparten el concepto de entropía.

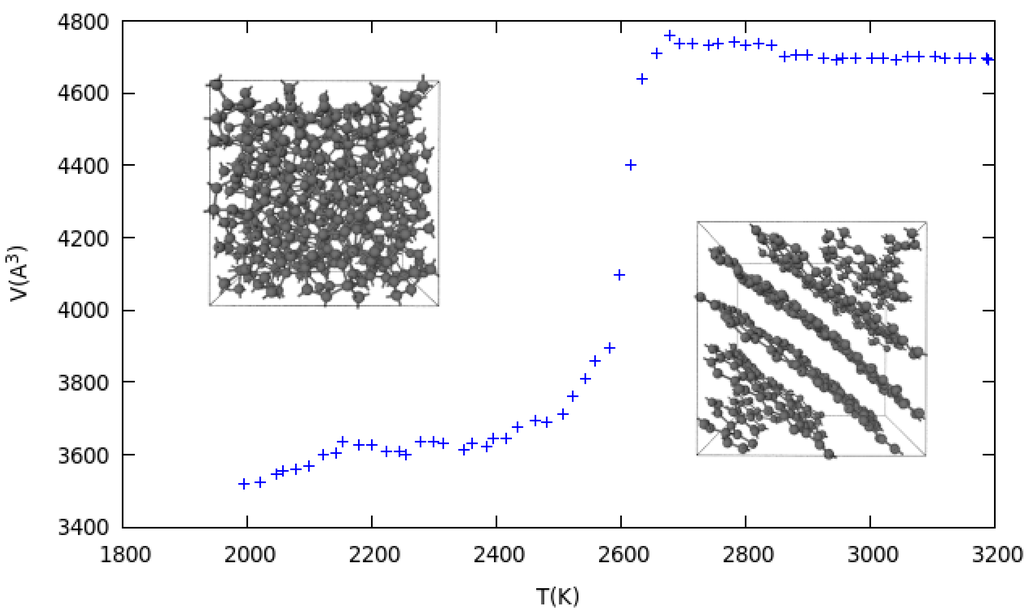
Método

- Se hicieron simulaciones de dinámica molecular clásica usando el programa LAMMPS con diferentes potenciales de interacción. [1].
- de Tomás ***et al.***[2] propusieron un método para obtener muestras de carbono amorfo a partir de un arreglo cúbico de átomos de carbono que son calentados y enfriados en un proceso extremadamente rápido.
- Se obtuvieron muestras de carbono amorfo, las que fueron caracterizadas tanto por su densidad como la relación sp^2/sp^3. Se estudió la evolución de las muestras con la temperatura y se calculó el módulo de bulto.

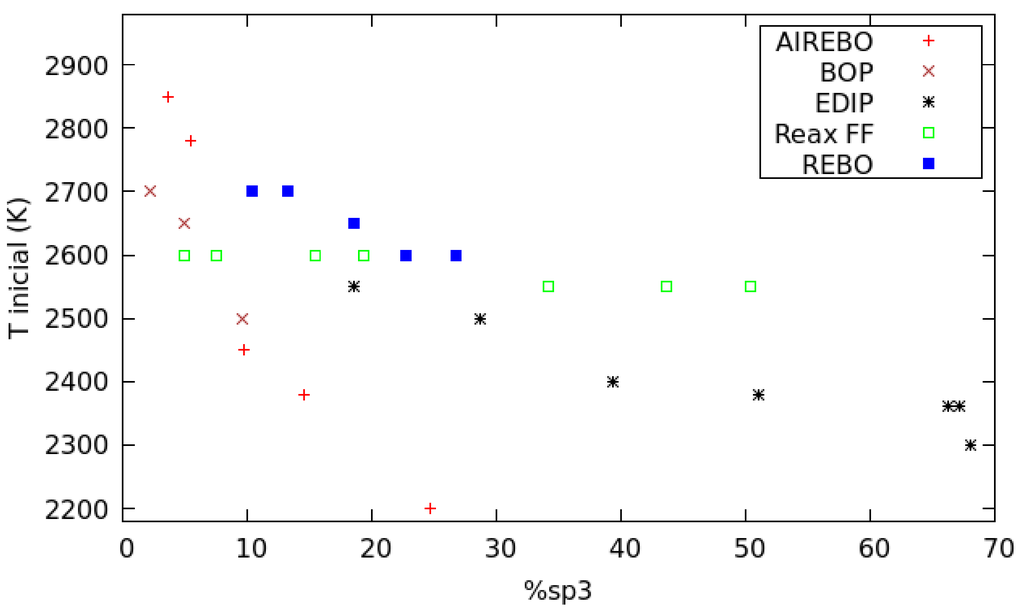


Resultados y Análisis

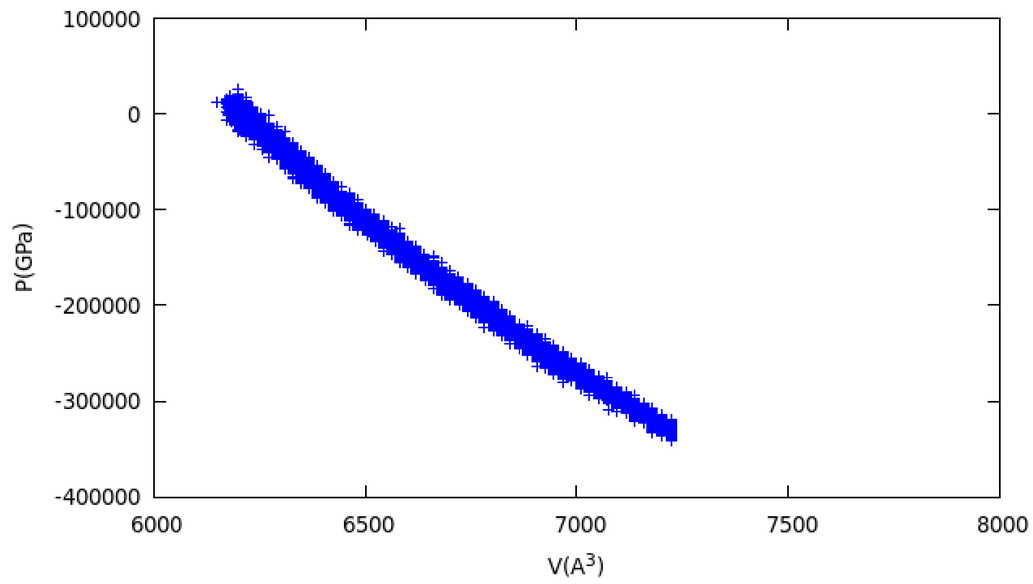
- Se observa un cambio de fase estructural a grafito estructural, que está de acuerdo con la derivación sobre las fases del carbono hecha en [3].



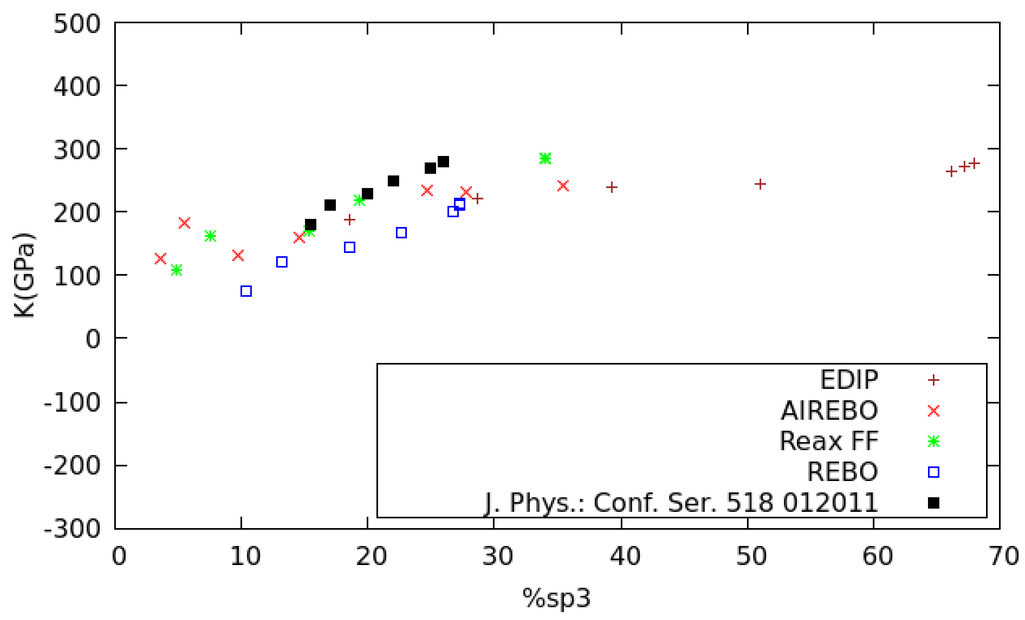
- Se trabajó con potenciales mencionados por de Tomás ***et al.*** [2], tales como REBOII, AIREBO, BOP, EDIP y ReaxFF.
- La medición de los puntos de cambio de fase para todas las muestras se obtuvo observando la dinámica dentro de la muestra usando el programa de visualización y Análisis OVITO [4].
- Se observa que la temperatura en que comienza el cambio de fase se reduce con el aumento de átomos con enlaces tipo sp^3, es decir, muestras más cercanas a diamante.



- El módulo de bulto de diferentes muestras se obtienen en simulaciones computancionales donde se calcuó la presión del sistema como función del volumen de la muestra. La muestra se comprime y luego se expande de manera lenta.
- El módulo de bulto se obtiene relacionando la presión y el volumen medidos en cada muestra, tal como se ve en el gráfico siguiente.



- Abajo se resume el módulo de bulto obtenido como función del % de sp^3 de las muestras para diferentes potenciales. A grandes razgos, se puede indicar que se obtuvieron valores entre 100 y 300 GPa lo que concuerda con el trabajo de [5] que sugiere valores entre los 200 y 350 GPa.



Conclusiones

- Se generaron muestras de carbono amorfo de diferentes densidades con potenciales de interacción que son ampliamente utilizados en simulaciones de materiales en base a carbono.
- Para la mayoría de potenciales de interacción se encontraron rangos de densidades (% de sp^3) en que el módulo de bulto es cercano al reportado en la literatura.
- Proyecciones: insertar defectos propios de centros de color en carbono amorfo con alto % de sp^3, evaluar más propiedades termodinámicas y vibracionales. Evaluar dichos sistemas usando formalismos más sofisticados como DFT.

Referencias

[1] S. Plimpton, J Comp Phys 117, 1-19 (1995).
[2] C. De Tomás, I. Suarez-Martínez ,N. Marks, Carbon 109,681-693 (2016).
[3] J. M. Zazula, LHC Project Note 87 (1997).
[4] A. Stukowski, Matter. Sci. Eng. 18, 015012 (2010).
[5] A. M. Ito, A. Takayama, Y. Oda, H. Nakamura, J. Phys.: Conf. Ser. 518, 012011 (2014).

Agradecimientos

D.C. agradece la beca doctoral de la Universidad Mayor. R.I.G. agradece el apoyo de FONDECYT con el proyecto # 11180557 y a CEDENNA.