

S.M

SAM CONAMET 2022

MAR DEL PLATA – 2 AL 6 DE MAYO 2022

Software open-source para la generación de estructuras bicontinuas estocásticas

Nicolás Vazquez^{(1)*}, Carlos J. Ruestes^(1,2)

⁽¹⁾ Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN), Universidad Nacional de Cuyo, Padre Jorge Contreras, 1300, M5502JMA, Mendoza, Argentina

⁽²⁾ Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB), CONICET – UNCuyo, Padre Jorge Contreras 1300, M5502JMA, Mendoza, Argentina

****Correo Electrónico (Nicolás Vazquez):** nicolasvazquez95@gmail.com

1. RESUMEN

Las microestructuras bicontinuas estocásticas, en las cuales se presentan dos fases contiguas interpenetradas, son características de muchos materiales. Algunos ejemplos se encuentran en las aleaciones producidas mediante descomposición espinodal, mezclas de polímeros, microemulsiones, espumas metálicas o poliméricas, e incluso en los metales nanoporosos producidos por corrosión selectiva [1]. Estos materiales se estudian, a menudo, mediante distintas técnicas de simulación computacional, para lo cual es necesario contar con un sistema que represente fielmente al objeto de estudio.

Los metales nanoporosos son un caso particular de estas microestructuras. Estos materiales, también conocidos como nanoespumas, cuentan con propiedades mecánicas excepcionales y sus aplicaciones resultan muy variadas, incluyendo componentes para la industria nuclear, aeroespacial, electrónica y de biomateriales. Para determinar sus propiedades mecánicas, se recurre a menudo a una combinación de ensayos de nanoindentación microcompresión. El uso de simulaciones computacionales (elementos finitos, dinámica molecular, etc) ha permitido la identificación de dimensiones características y aspectos topológicos que influyen en sus propiedades mecánicas, ofreciendo algunas pautas para el desarrollo de estos materiales [2].

En este contexto, la generación de modelos computacionales fidedignos resulta clave para la correcta evaluación de estos materiales. El esquema tradicional de preparación de muestras nanoporosas computacionales se ha basado principalmente en el método de campo de fase (phase-field) mediante la ecuación de Cahn-Hilliard, y métodos Monte Carlo. Usualmente, una dificultad en esta tarea es el costo computacional de preparar la topología requerida en las muestras, especialmente para sistemas de gran tamaño, factor que ha dificultado el avance de las investigaciones. Recientemente, e inspirados es una propuesta de Cahn, Soyarslan et al. [3] proponen un nuevo método para la generación de estructuras bicontinuas periódicas basado en la superposición de ondas sinusoidales con longitud de onda fija y un conjunto fijo de direcciones, dentro de una celda cúbica. Aunque este método ha sido aplicado exitosamente a la generación de muestras para simulaciones mediante elementos finitos [3] y dinámica molecular [4], no se advierte la existencia de una herramienta software libre para la generación de estos modelos.

En este trabajo se presenta un software de código abierto para la generación de estructuras bicontinuas en forma sencilla y eficiente. En particular, se trata de una herramienta desarrollada en Python, que permite la generación de espumas nanoporosas con diversa estructura cristalina y cuyo formato es completamente compatible con LAMMPS. A través de un caso de estudio, se presenta además una caracterización completa de una espuma de tantalio nanoporoso.

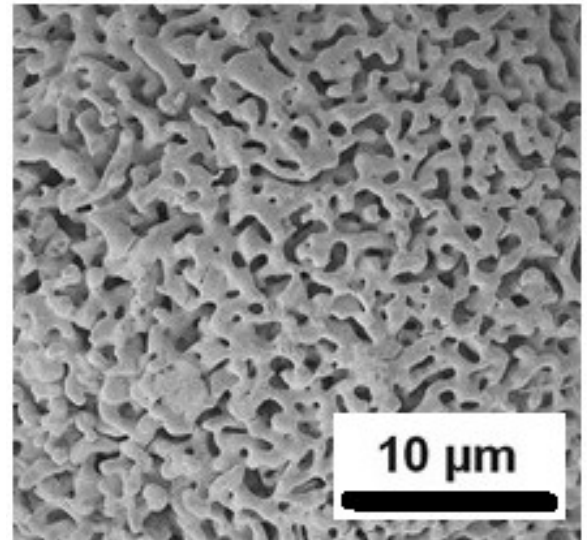
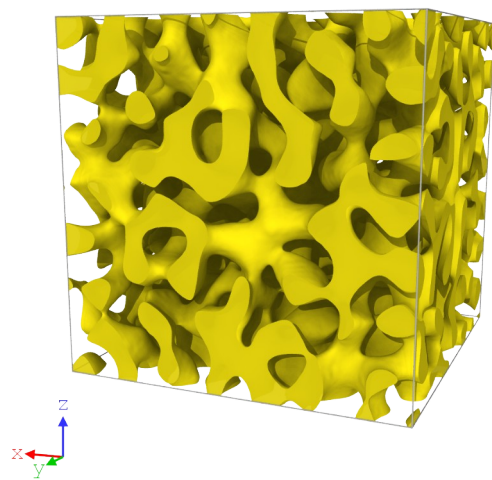


Figura 1. Izq. Modelo atomístico de tantalio nanoporoso generado con la herramienta desarrollada en este trabajo. Der. Micrografía SEM de una muestra de tantalio nanoporoso producida mediante corrosión selectiva.

2. REFERENCIAS

1. Weissmüller, J., Newman, R. C., Jin, H. J., Hodge, A. M., & Kysar, J. W. (2009). Nanoporous metals by alloy corrosion: formation and mechanical properties. *Mrs Bulletin*, 34(8), 577-586.
2. Richert, C., & Huber, N. (2020). A review of experimentally informed micromechanical modeling of nanoporous metals: from structural descriptors to predictive structure–property relationships. *Materials*, 13(15), 3307.
3. Soyarslan, C., Bargmann, S., Pradas, M., & Weissmüller, J. (2018). 3D stochastic bicontinuous microstructures: Generation, topology and elasticity. *Acta Materialia*, 149, 326–340. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.01.005>
4. Liu, C., & Branicio, P. S. (2019). Efficient generation of non-cubic stochastic periodic bicontinuous nanoporous structures. *Computational Materials Science*, 169, 109101. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109101>

3. TOPICO:

SAM: 17. Simulación computacional de materiales

4. TIPO DE PRESENTACIÓN SOLICITADA (ORAL O PÓSTER): POSTER