

Estudio Preliminar de Dinámica Molecular para analizar la Interacción entre el hexatitanato de potasio y cúmulos nanométricos de aluminio

José Manuel Cervantes Viramontes^a, Luis Humberto Mendoza Huizar^b, Clara Hilda Ríos Reyes^b, Irery Aydee Sustaita Torres^a, y Eduardo García Sánchez^a

^aUniversidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica.
Av. López Velarde 801, Col. Centro, Zacatecas, Zac., México, 98000.

eduardogarciasanchez@gmail.com

^bUniversidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería. Área Académica de Química. Ciudad del Conocimiento. Carretera Pachuca-Tulancingo. Km. 4.5, Mineral de la Reforma Hidalgo, 42186.

chrr_hgo@yahoo.com.mx

2014 Published by *DIFU*_{100ci}@ <http://www2.uaz.edu.mx/web/www/publicaciones>

Resumen

En el presente trabajo, se efectuaron cálculos de Dinámica Molecular con el objeto de determinar si puede llevarse a cabo la incorporación de la fibra del Hexatitanato de Potasio sobre una matriz de aluminio. Para lo cual se desarrolló una simulación de manera inicial asignando primero velocidades a todos los átomos de acuerdo con una distribución de Maxwell-Boltzmann. A continuación, se simuló un calentamiento arriba del punto de fusión para la aleación (Superficie de Aluminio y Hexatitanato de Potasio) a 1000 K y luego se simuló un enfriamiento hasta llegar a 273 K obteniendo una estructura amorfa. Durante este proceso, las ecuaciones de movimiento de Newton fueron resueltas usando un paso de tiempo finito por medio del algoritmo de Verlet. Se utilizó la aproximación de energía Pair Wise mediante el uso de términos atractivos de VDW y términos de interacción electrostática. Se encontró que la fibra de hexatitanato de potasio y la matriz de aluminio inducen una posible segregación química y estructural al generarse la aleación.

Palabras clave: Dinámica Molecular, Aluminio, Hexatitanato de Potasio.

1. Introducción

Los materiales de desecho, han sido definidos como algún tipo de material producido por los humanos o por alguna actividad industrial sin valor final. El crecimiento en la cantidad y tipos

de desechos, tales como plásticos, vidrios, arcillas quemadas, metales (principalmente aluminio, hierro, cobre), papel, etc., así como la escasez de espacios para depositarlos y la carencia de materias primas, extreman la emergencia de encontrar maneras innovadoras de reciclar y rehusar los materiales de

desecho [1-2], además de que dicho proceso tenga un menor impacto ambiental y sea rentable, el Aluminio reciclado es uno de los que cumplen con lo anterior, ya que el proceso para obtener Aluminio, es a través de la bauxita, que se encuentra en los primeros 3 metros del subsuelo de la selva y que conlleva, a que se destruya una gran parte de la tierra natural, una gran cantidad de árboles y plantas, y los hábitats naturales de especies del planeta, esto permitiría desacelerar la destrucción de los ecosistemas, además implica: Generación de grandes cantidades de dióxido de carbono y otros gases contaminantes, desechos contaminantes (fango rojo compuesto de óxidos de hierro, titanio, . . .), consumo de combustibles, uso de grandes cantidades de energía eléctrica, etc. Y con el uso del Aluminio reciclado, se podrían eliminar desechos, ahorrar energía y conservar los recursos naturales. Además de que el aluminio reciclado mantiene las mismas propiedades y características que el Aluminio primario, es 100 % reciclable y se puede reciclar indefinidamente sin disminuir la calidad del mismo.

A pesar de que el hombre ha utilizado diversos metales a través de la historia, el aluminio es considerado ya el metal del siglo XXI, esto se debe, a que es el metal que más se utiliza después del acero y es el más abundante en la corteza terrestre. El aluminio es un metal ligero, blando pero resistente, de aspecto gris plateado. Su densidad es aproximadamente un tercio de la del acero y el cobre. Es muy maleable y dúctil, y es apto para el mecanizado y la fundición. Es un excelente conductor del calor y de la electricidad. No se altera en contacto con el aire, ni se descompone en presencia del agua. Debido a su elevado calor de oxidación, se le forma rápidamente al aire libre una fina capa superficial de óxido de aluminio (Alúmina Al_2O_3) impermeable y adherente que detiene el proceso de oxidación, proporcionándole al aluminio resistencia a la corrosión y durabilidad. Magnífico reflector de luz, no es magnético y fácil de ensamblar [3]. Desde el punto de vista físico, el aluminio puro posee una resistencia muy baja a la tracción y una dureza escasa. En cambio, unido en aleación con otros elementos, el aluminio adquiere características mecánicas muy superiores.

En los últimos años, el diseño y la fabricación de estructuras fibrosas con tamaño característico no superiores a 100 nm, han atraído mucho la atención por sus singulares propiedades físicas, químicas y aplicaciones potenciales. En especial las fibras de carbono, de vidrio, de carburo de silicio y de titanatos de

potasio, $K_2O \cdot nTiO_2$ ($n = 2 - 8$), dependen del valor de n . La característica de los titanatos de potasio con alto contenido de potasio ($n = 2, 4$) es la existencia de una capa de estructura. Ellos muestran una característica de capacidad de intercalación y actividad catalítica. Sin embargo en el caso de los titanatos de potasio con bajo contenido de potasio ($n = 6, 8$), tienen una estructura túnel y muestran una buena propiedad de aislamiento térmico y una buena estabilidad química [4].

Específicamente, el Hexatitanato de Potasio ($K_2Ti_6O_{13}$) presenta una estructura que está compuesta por octaedros de TiO_6 formando túneles con unión a través de las esquinas. En la estructura de este material, los iones de potasio están encerrados en una estructura de túneles y aislados del medio ambiente, haciéndolos más resistentes a un ataque químico, con lo cual, se evita que puedan escapar de su estructura de túnel, esto permite que dicha fibra pueda presentar amplias aplicaciones como agentes de reforzamiento. Entre las aplicaciones del hexatitanato de potasio más destacadas, se presentan por ejemplo, las reportadas por Hareyama y Ogawa [5], donde el papel de impresión de billetes de banco es rellenado con fibras de $K_2Ti_6O_{13}$, es se debe a su característica de poseer fibras relativamente pequeñas a la hora de poderse ocultar, permitiendo la marca de agua y el refuerzo de la hoja resultante, siendo extremadamente conveniente el uso de esta fibra para su impresión y manejo, evitando el desgarramiento. De la misma manera, la campaña de AsburyCarbons reporta que las fibras de hexatitanato de potasio utilizadas como materia de reforzamiento en metales, ayudan a mejorar las características de fricción y la resistencia al desgaste total; como el revestimiento de frenos de automóviles, actúa aumentando la fuerza de la fricción y a la rigidez mecánica, y aumentando la resistencia a las temperaturas altas [6]. El Hexatitanato de potasio pertenece a los materiales que tienen un interés creciente, debido a su potencial importancia económica, ya que una de sus características importantes, es el bajo costo de producción, que es uno de los factores críticos para implementarse en aplicaciones comerciales. Aparte de ser relativamente barato, es un material fibroso que tiene buena durabilidad térmica, resistividad química y dispersabilidad, y además, se ha encontrado que es útil como un material de refuerzo para plásticos y cerámicas, para pinturas aislantes al calor y forros de frenos de automóviles.

Recientemente, el estudio y desarrollo de aleaciones metálicas ha despertado un fuerte interés debido a que estas presentan buenas propiedades mecánicas y fí-

sicas, tales como una alta resistencia mecánica, alta resistencia a la corrosión y menor densidad que materiales equivalentes. Hasta donde sabemos, no existen trabajos de investigación que se enfoquen al desarrollo de compósitos basados en las mezclas de $K_2Ti_6O_{13}$ / Aluminio. Por lo tanto, esta es un área de oportunidad para la generación de nuevo conocimiento científico y tecnológico.

2. Metodología

En la actualidad, las simulaciones computacionales se han transformado en una poderosa herramienta que permite modelar, predecir y comprender sistemas físicos de interés. La capacidad de obtener resultados concretos, está estrechamente relacionada con la complejidad del modelo físico y el grado de precisión que se desea obtener. Las simulaciones de fenómenos físicos utilizando avanzadas técnicas de programación y computación, permiten abarcar problemas complejos y verificar la validez de las aproximaciones realizadas con los resultados teóricos y numéricos. Además, se puede extender el dominio de teorías, de las cuales podemos extraer resultados verificables experimentalmente al tener a disposición una herramienta alternativa y complementaria a las ya conocidas. Una técnica que permite estudiar la formación y estructura de aleaciones, es la simulación por Dinámica Molecular (DM). La DM analiza los potenciales de interacción que existen entre los átomos que forman un determinado material, conociéndose la posición y velocidad de cada átomo del material en cada instante. La calidad de los resultados de la simulación, dependen directamente, de si el potencial interatómico refleja realmente la interacción entre los átomos [7]. En este trabajo, se han desarrollado diversos cálculos de dinámica molecular para sistemas atómicos y periódicos con miras a determinar la incorporación del hexatitanato de potasio en la matriz de aluminio. La simulación se inició asignando primero velocidades iniciales a todos los átomos de acuerdo con una distribución de Maxwell-Boltzmann a una temperatura particular. Desde este punto de partida, las ecuaciones de movimiento de Newton fueron resueltas usando un paso de tiempo finito por medio del algoritmo de Verlet [8]. En todas las simulaciones, a cada átomo se le permitió moverse libremente, aunque esto aumenta sustancialmente el costo computacional. Las simulaciones por dinámica molecular se realizaron utilizando el software HYPERCHEM y GABEDIT en una computadora HP con 84 procesadores y 8 GB de RAM. Se utilizó la aproximación de energía por pares (Pair Wise) mediante el uso de términos atractivos de van der

Waals (VDW) y términos de interacción electrostática [7].

3. Resultados

En la actualidad las simulaciones computacionales se han transformado en una poderosa herramienta que permite modelar, predecir y comprender sistemas físicos de interés. La capacidad de obtener resultados concretos está estrechamente relacionada con la complejidad del modelo físico y el grado de precisión que se desea obtener. La exactitud de la simulación dependerá de la capacidad del potencial de interacción de reproducir el comportamiento del sistema bajo las condiciones determinadas. Es por esto que los resultados de la simulación serán confiables solo si las fuerzas que interactúan entre las partículas durante la simulación son similares a las fuerzas del sistema real. En DM el movimiento de las partículas se rige de acuerdo a las leyes de la mecánica clásica, en particular por la segunda ley de Newton.

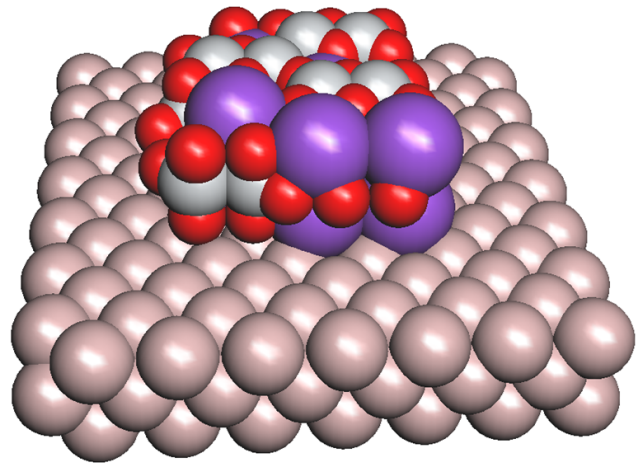


Figura 1. Fibra de Hexatitanato de Potasio sobre la matriz de Aluminio.

En la Figura 1 se puede apreciar el modelo inicial utilizado en la simulación, en dicha figura, se sitúa la fibra del hexatitanato de potasio sobre una matriz de superficie compuesta por átomos de Aluminio. Con este modelo se simuló un calentamiento arriba del punto de fusión para la aleación (Superficie de Aluminio y Hexatitanato de Potasio) a 1000 K y luego se simuló un enfriamiento hasta llegar a 273 K obteniendo una estructura amorfa. Durante esta etapa, se asignaron velocidades a todos los átomos de acuerdo con una distribución de Maxwell-Boltzmann y se resolvieron las ecuaciones de movimiento de Newton usando un paso de tiempo finito por medio del algoritmo de Verlet,

utilizando la aproximación de energía Pair Wise mediante el uso de términos atractivos de VDW y términos de interacción electrostática. En la Figura 2 se puede apreciar el comportamiento del Modelo después de dos femtosegundos a 1000 K, en el cual se describen las trayectorias de los átomos que inicialmente se mostraron en la Figura 1. Después de disminuir la temperatura hasta 273 K, en la figura 3 se pueden apreciar todos los átomos que comprenden a la fibra del hexatitanato de potasio y a la matriz de aluminio. En dicha figura se puede apreciar, que los átomos de potasio (color azul) salen de la estructura molecular del hexatitanato y únicamente los átomos de Titanio y Oxígeno son los que se incorporan a la matriz del aluminio.

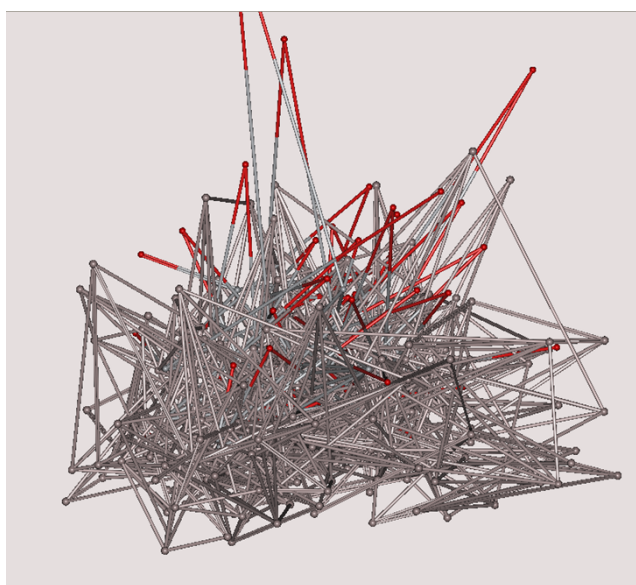


Figura 2. Modelo después de dos femtosegundos a 1000 K.

Por lo cual, los resultados obtenidos por dinámica molecular sugieren que es posible incorporar hexatitanato de potasio al aluminio en su punto de fusión. Es importante comentar que, un estudio adicional, sobre la determinación del volumen y segregación máxima en función de la concentración de hexatitanato, permitirían definir la concentración a utilizar para obtener las propiedades mecánicas y elásticas deseadas.

4. Conclusiones

En este trabajo, se generó un modelo de aleación de Aluminio y Hexatitanato de potasio mediante simulación por Dinámica Molecular. Se simuló un calentamiento por sobre la temperatura de fusión para la mezcla (superficie de aluminio y Hexatitanato de potasio) a 1000 K y luego fue simulado un enfriamiento a 273 K obteniendo una estructura amorfa. Se concluye que la concentra-

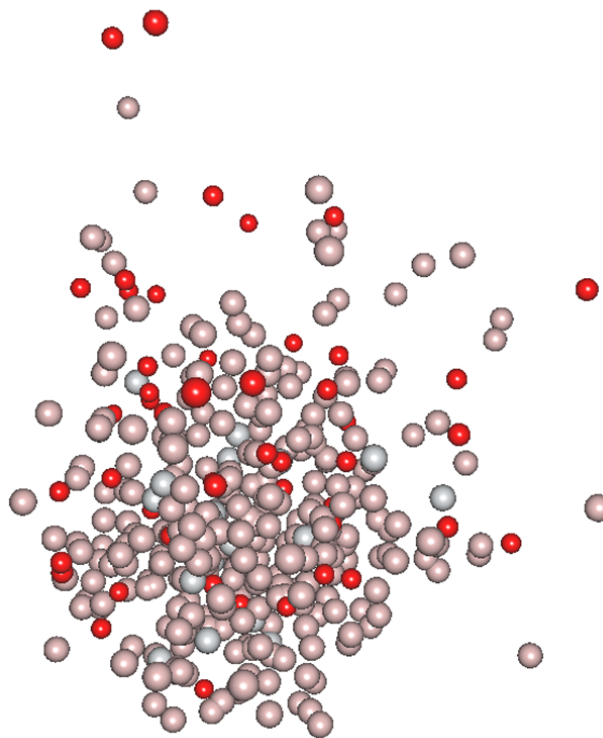


Figura 3. Modelo después de enfriar el sistema a 273 K.

ción de hexatitanato de potasio y la matriz de aluminio inducen una posible segregación química y estructural al generarse la aleación. Aunque es importante resaltar, que se requieren más estudios para identificar la concentración máxima de hexatitanato de potasio que permita obtener una segregación química y estructural máxima, que permita producir un aumento de volumen libre y con esto una disminución de la resistencia al corte de la aleación obtenida.

Referencias

- [1] M. M. Disfani, A. Arulrajah, M. W. Bo and R. Hankour, "Recycled crush glass in road work applications". *Waste Management*, Vol. 31, No. 11, pp. 2341–2351, 2011.
- [2] V. Loryuenyong, T. Panyachai, K. Kaewsimork, C. Siritai, "Effects of recycled glass substitution on the physical and mechanics properties of clay bricks". *Waste Management*, Vol. 29, No. 10, pp. 2717–2721, 2009.
- [3] Aluminio, Enero 2014. [Online] Available: http://www.aprendizaje.com.mx/Curso/Proceso1/-Temario1_IVAlu.html
- [4] J. K. Lee, K. H. Lee and H. Kim, "Microstructural evolution of potassium titanate whiskers during the synthesis by the calcination and slow-cooling method". *J. Mater. Sci.*, Vol. 31, No. 20, pp. 5493–5498, 1996.
- [5] X. Icheng, CH. Yang, L. Guan and B. Yan, "TiB₂/Al₂O₃ ceramic particle reinforced aluminum fabricated by spray deposition". *J. Mater. Sci. Engineering A*, Vol. 496, No. 1-2, pp. 52–58, 2008.

- [6] ASBURY carbons, Agosto 2010. [Online] Available:
<http://asbury.com/materials/other-materials/>
- [7] J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. 1er. ed. New York: John Wiley & Sons Inc., 1997.
- [8] M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer Simulation of liquids. Oxford: Oxford Science Publications, 2001.