



## MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE MECHANICAL CHARACTERISTICS OF Ti/Al BILAYER USING NANOINDENTATION

D. M. Devia<sup>(1)</sup>, Harold Duque<sup>(1)</sup>, Fernando Mesa<sup>(1)\*</sup>

<sup>(1)</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia.

\*Correo Electrónico: [femesa@utp.edu.co](mailto:femesa@utp.edu.co)

### RESUMEN

*Se empleó la simulación por dinámica molecular de nanoindentación usando el potencial de esfera dura en películas delgadas de Ti, Al y bicapa de Ti/Al con interacción monocristal BCC y FCC [1]. Se consideraron condiciones de frontera fijas y el potencial radial repulsivo fue usado para modelar la indentación entre la punta y la superficie de la muestra. Las propiedades mecánicas del material a 300 K fueron obtenidas para las películas delgadas de Ti, Al y bicapa de Ti/Al [2]. Los parámetros elásticos y de dureza fueron obtenidos de las curvas de carga y descarga generadas de la simulación. Los resultados muestran una mejor respuesta mecánica en la bicapa comparado con las monocapas de los recubrimientos.*

### ABSTRACT

*Molecular dynamics (MD) simulations of nanoindentation using the hard sphere potential were carried out for Ti, Al and Ti/Al bilayer thin films with interaction of BCC and FCC single-crystal [1]. Fixed boundary conditions were used and the repulsive radial potential was employed for modeling the interaction between the tip and sample surface. Mechanical properties of the material at 300 K were obtained for Ti and Al thin films and Ti/Al bilayers [2]. Hardness and elastic parameters were determined from the load-unload curves obtained by means of the simulations. These results show a better mechanical response in the case of bilayers compared to the monolayers.*

### REFERENCIAS

1. S. Amaya-Roncancio, E. Restrepo-Parra, D. M. Devia-Narvaez, D. F. Arias-Mateus, M. M. Gómez-Hermida, “Molecular dynamics simulation of nanoindentation in Cr, Al layers and Al/Cr bilayers, using a hard spherical nanoindenter”, DYNA, Vol. 81 (2014), pp. 102-107.
2. D. M. Devia, E. Restrepo-Parra, J.M.Velez-Restrepo, “Structural and Morphological Properties of Titanium Aluminum Nitride Coatings Produced by Triode Magnetron Sputtering”, ing. cienc., Vol. 10, (2014), pp. 51–64.

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** T18

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** P (Póster)