

# SIMULACIÓ A ESCALA ATÒMICA DE DEFECTES EN METALLS I ALIATGES

Anna Serra

<sup>1</sup>Departament Matemàtica Aplicada III e-mail: a.serra@upc.edu

**Paraules Clau:** dislocacions, fronteres de gra, macles, dany per radiació, dinàmica molecular.

**Resum:** *Les propietats físiques dels materials amb estructura atòmica ordenada estan directament relacionades amb la estructura cristal·lina dels àtoms que els formen i, per tant, es veuen fortament modificades pels defectes d'ordenació. Aquí es presenta un resum de l'estudi de defectes creats en metalls de les estructures cristal·lines més comunes: Fe, Cu, Zr i Ti, i.e., cúbica centrada en el cos (bcc), cúbica centrada en les cares (fcc) i hexagonal compactes (hcp). En particular, es descriuen els defectes que dominen la deformació plàstica (per lliscament i maclat), els produïts per indentació i els creats en materials irradiats.*

## 1. INTRODUCCIÓ

Les propietats físiques dels materials amb estructura atòmica ordenada (estructura cristal·lina), com plasticitat (dúctil, fràgil) o conductivitat (difusió del calor, resistència elèctrica), depenen de la estructura cristal·lina dels àtoms que els formen. Donat que tots els materials cristal·lins amb temperatura més gran que zero tenen defectes intrínsecs d'ordenació i que petites modificacions locals de la ordenació poden modificar en ordres de magnitud una propietat, l'estudi dels defectes és una necessitat i un repte. A l'any 1934 es va publicar el primer article on es definia el concepte de dislocació com a un model per explicar les discrepàncies (ordres de magnitud!) entre els càlculs teòrics de l'esforç de deformació d'un cristall perfecte i els resultats experimentals. De fet les equacions constitutives emprades en el medi continu utilitzen paràmetres empírics que recullen, en promig, l'acció dels defectes. Avui, gracies a la potència de càlcul dels ordinadors, podem estudiar el comportament col·lectiu de milions d'àtoms i establir una connexió cada cop més quantitativa entre el comportament a escala atòmica i les propietats macroscòpiques. El coneixement de la configuració atòmica dels defectes, les interaccions mútues i la manera de generar-los o eliminar-los permet la fabricació de nous materials i està en la base tant de la recerca en electrònica i nano-enginyeria, com en la millora de les propietats dels aliatges emprats en la construcció de grans estructures metàl·liques, avions, reactors nuclears, etc.

La recerca del nostre grup està centrada en l'estudi dels defectes associats a la deformació plàstica (dislocacions, macles i fronteres de gra), als defectes generats en metalls irradiats (defectes puntuals i els seus aglomerats) i a les interaccions entre ells.

## 2. MÈTODE

El mètode utilitzat és la simulació atòmica per dinàmica molecular. És un mètode estàndard en l'àmbit de la simulació, tot i que cada grup tendeix a produir els seus propis codis per poder adaptar-los al tipus particular de problema a estudiar.

El sistema a simular conté les coordenades de  $N$  àtoms que evolucionen en el temps sota la interacció de les forces interatòmiques proporcionades per una llei (potencial interatòmic). El conjunt està envoltat d'altres àtoms que proporcionen les condicions de contorn necessàries

per que el sistema estudiat representi una part d'un volum macroscòpic, evitant així l'influència no desitjada de les superfícies. El nombre d'àtoms,  $N$ , depèn del defecte i pot variar des de  $10^3$  fins a  $10^7$  en els estudis més recents de nano-indentació.

El potencial interatòmic és una llei empírica o semi-empírica, de paràmetres ajustats amb valors experimentals o deduïts de càlculs *ab initio*, que representa la interacció entre dos àtoms en el sí del material.

### 3. RESULTATS

#### a) Dislocacions

Les dislocacions són defectes essencials per entendre la deformació plàstica. Des de fa més de vint-i-cinc anys estem fent recerca de tots els tipus de dislocacions en ferro (bcc) coure (fcc), zirconi i titani (hcp). En la mesura que els potencials interatòmics milloren i els ordinadors tenen més capacitat de memòria i de càlcul s'han pogut tractar interaccions més complexes. S'ha estudiat la estructura atòmica de les dislocacions, la seva mobilitat, l'esforç crític per moure-les i la interacció de les dislocacions amb els aglomerats. En la figura 1 tenim un esquema de la interacció dislocació – aglomerat en el zirconi pel cas d'aglomerats amb moviment paral·lel al pla de lliscament de la dislocació. Veiem que hi pot haver absorció de l'aglomerat, recombinació parcial i repulsió. En cada cas s'ha indicat l'esforç màxim necessari per produir la reacció.

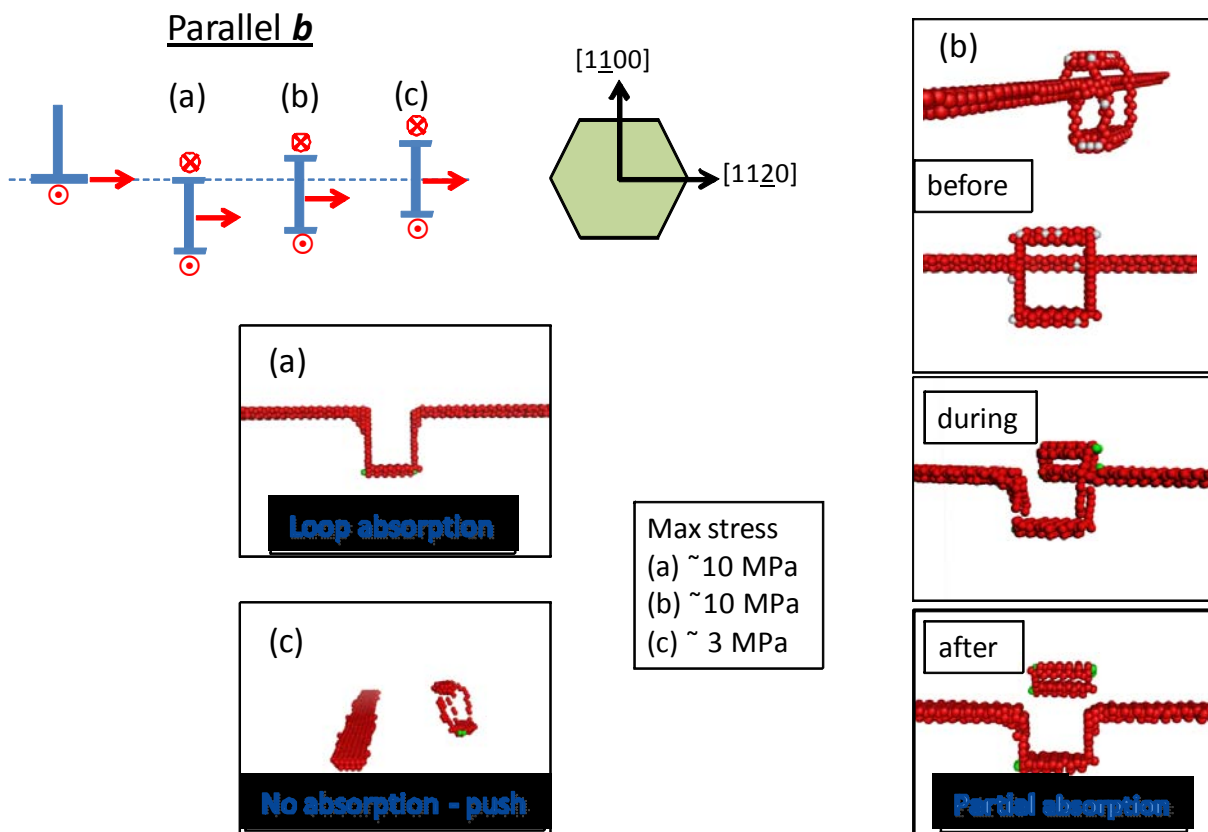


Figura 1. Interacció en el zirconi d'una dislocació de falca (defecte en línia) amb un aglomerat d'intersticials (tan sols els àtoms de la perifèria de l'aglomerat estan dibuixats).

#### b) Fronteres de gra

La recerca es basa en la teoria de Defectes en Interfases que hem aplicat des de la seva creació (veure referències 68 i 70 en [1]). Els resultats de la simulació van ser 'experiments' per contrastar la teoria. Hem explicat la transformació, observada experimentalment, de fronteres incoherents en 'plateaux' coherents limitats per dislocacions com a mecanisme d'alliberació de tensions. El treball més recent descriu el mecanisme d'acoblament de la migració d'una frontera d'angle petit amb la cisalla. Es ben conegut que les fronteres d'angle petit estan formades per una alineació de dislocacions massives. Fins ara es donava per entès que la frontera migrava per desplaçament d'aquestes dislocacions. Això implicava la necessitat d'esforços de cisalla molt grans. En la nostra recerca hem vist que hi ha un altre mecanisme molt més efectiu per moure la frontera basat en la creació de dislocacions de frontera que satisfà de manera exacta la migració i necessita esforços un ordre de magnitud més petits.

### c) Maclat en metalls d'estructura hexagonal compacta: Zircó i Titani

El maclat és un mode de deformació plàstica predominant en els sistemes cristal·logràfics amb baixa simetria degut a la falta de sistemes de lliscament que permetin acoblar els modes de deformació. La macla és una regió on ha canviat l'orientació dels plans cristal·logràfics afavorint així la orientació dels plans de lliscament. Les macles estan delimitades per unes fronteres majoritàriament formades per un pla cristal·logràfic de baix índex. El moviment d'aquestes fronteres regeix la creació i desaparició de la macla i la interacció de les fronteres amb els altres defectes incideix directament en la plasticitat del material. Aquest moviment de la frontera de macla i aquestes interaccions són l'objecte de la recerca aquí descrita.

S'ha estudiat l'estructura atòmica de les fronteres i els defectes de línia creats en la pròpia frontera (dislocacions de macla) responsables de la translació de la frontera. El moviment d'aquestes dislocacions, que formen un graó a la frontera, són els responsables del seu creixement. El moviment és conservatiu, i no necessita processos de difusió atòmica. S'han caracteritzat les dislocacions de les principals macles, donant l'estructura atòmica, la mobilitat i esforç crític necessari pel seu desplaçament. S'ha descobert un mecanisme de creació de dislocacions de macla associat a la interacció de les dislocacions massives amb la frontera de macla. Aquesta font de dislocacions assegura la continuïtat del moviment de la frontera.

S'ha estudiat la interacció de les fronteres de macla amb els defectes produïts durant la irradiació de zirconi. Tot seguit es descriuen uns resultats com exemple de la recerca descrita.

S'ha simulat la frontera de macla (10-12) per unió de dos monocristalls girats en sentits contraris fins a fer coincidir els plans de la família {10-12}. El moviment de la frontera de macla s'ha induït per lliscament de la dislocació de macla corresponent sobre el pla de la frontera. A continuació s'han introduït aglomerats de vacants i de intersticials en un dels cristalls. Els aglomerats són mòbils i poden lliscar en el pla basal en direccions formant  $60^{\circ}$  amb el pla de macla o bé en direcció paral·lela al pla. Per tant la interacció es pot produir per apropament dels aglomerats a la macla o vice versa. S'han observat les següents reaccions:

i) restricció de la mobilitat de la frontera (inhibició del maclat), ii) canvi de la orientació i forma de l'aglomerat, iii) arrossegament a distància (drag) de l'aglomerat per la frontera, finalment, iv) total o parcial absorció de l'aglomerat per la frontera amb ulterior lliscament de l'aglomerat al ésser arrossegat per la frontera.

De lo anterior es conclou que l'esforç necessari per moure la frontera s'incrementa amb la presència dels defectes de radiació. Aquest efecte podria inhibir la creació o creixement de les macles en front d'un altre sistema de lliscament amb esforç menor; de fet hi ha evidència experimental en zirconi irradiat a dosis elevades. D'altra banda, les fronteres de macla poden actuar com a embornals o centres de recombinació dels defectes produïts per radiació.

#### d) Dany per radiació

Estudiem els defectes creats en els reactors nuclears en el marc del projecte europeu PERFORM60 [2].

En els materials bombardejats per partícules energètiques es creen parelles de defectes ‘vacant – intersticial’ que, en difondre’s pel material formen aglomerats. Aquests interactuen amb els altres defectes modificant notablement les propietats macroscòpiques com, per exemple, la temperatura de transició dúctil–fràgil.

Les característiques dels aglomerats que estudiem son la mobilitat, la capacitat de ser obstacles per les dislocacions i altres defectes així com els mecanismes que inhibeixen el seu moviment. Així, en l’estudi de la difusió dels aglomerats en ferro, mentre que en els més petits s’han detectat configuracions immòbils que disminueixen la capacitat de difusió, els més grans, visibles per TEM, son mòbils amb energia de migració molt petita i independent de la mida. D’altra banda, els elements en solució, com el carbó (C), poden disminuir la mobilitat d’aquest aglomerats, essent més eficaços quan formen complexos  $nC-mVacants$ .

#### a) Nano-indentació

S’està simulant un sistema de 8 milions d’àtoms de coure format per 2 cristalls units per una frontera (pla blau en fig.2). Les dues direccions del pa de frontera es repeteixen periòdicament simulant un bicristall de dimensions infinites. Un indentador penetra un cristall a velocitat constant creant llaços de dislocació (veure figura 2) que en arribar a la frontera queden aturats. Per que els defectes traspassin la frontera es necessita un esforç acumulat considerable. La frontera actua com una barrera per la difusió dels defectes en el cristall inferior. S’ha fet un estudi en funció de la velocitat del indentador i del seu diàmetre.

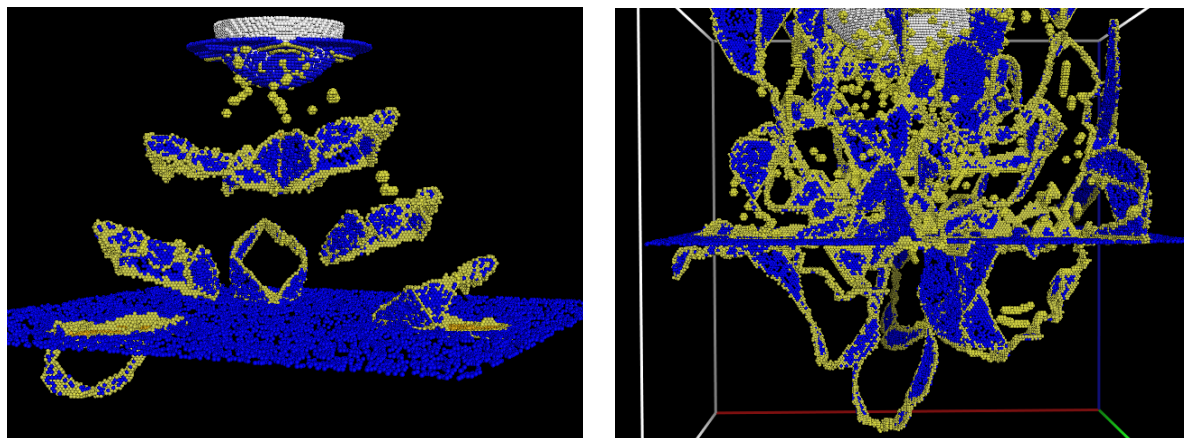


Figura 2. Nano-indentador (blanc). Tan sols els defectes estan representats (àtoms que no estan en una posició cristal·logràfica perfecta). En blau la frontera que separa els 2 cristalls.

#### REFERÈNCIES

- [1] R.C. Pond (1989), ‘Line defects in interfaces’ en *Dislocations in Solids*, vol 8, p. 1 - 66
- [2] Project del FP7 Unió Europea: “Prediction of the Effects of Radiation For reactor pressure vessel and in-core Materials using multi-scale modelling – 60 years foreseen plant lifetime”