

Simulación de defectos cristalinos en Zr mediante potenciales interatómicos de muchos cuerpos

- Julián R. Fernández^{1,2}

¹CONICET

²Comisión Nacional de Energía Atómica Instituto Sábató Universidad Nacional de Gral. San Martín

El Zr es un metal muy usado en aleaciones en la industria nuclear por sus propiedades mecánicas y térmicas, resistencia a la corrosión y baja sección eficaz de captura neutrónica. La irradiación a la que se ve sometido durante el servicio genera pares de Frenkel, es decir, un autointersticial más una vacancia. Estos defectos pueden migrar acumulándose en sumideros (superficie, bordes de grano, interfases, etc.), produciendo el fenómeno de crecimiento por irradiación. En su migración, vacancias y autointersticiales también pueden agruparse entre sí y formar otros defectos de mayor tamaño (aglomerados) que interactúan con dislocaciones, modificando las propiedades mecánicas de la aleación. El modelado clásico de estos defectos a escala atómica brinda la posibilidad de caracterizarlos en un detalle difícil de lograr experimentalmente y sin entrar en las complicaciones que exige un cálculo de primeros principios. En el presente trabajo se consideran dos modelos diferentes del tipo Átomo Embebido Modificado o MEAM (el modelo original de Baskes [1] y una variante de éste con funciones más flexibles [2]) y se evalúa su capacidad para reproducir características de la aglomeración de defectos puntuales, además de otras propiedades. Los potenciales tipo MEAM constituyen una mejora al EAM tradicional, puesto que involucran dependencias angulares, necesarias para representar el carácter covalente de la interacción atómica en algunos metales. Se encuentra que los resultados hallados para uno de los potenciales obtenidos aproximan mejor algunos resultados experimentales y cálculos de primeros principios cuando se compara con un modelo EAM muy usado en la literatura para este metal [3].

Referencias:

[1] M. I. Baskes, Phys. Rev. B **46**, 2727 (1992).

[2] T. J. Lenosky, B. Sadigh, E. Alonso, V. V. Bulatov, T. Díaz de la Rubia, J. Kim, A. F. Voter, and J. D. Kress, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **8**, 825 (2000).

[3] M. I. Mendeleev, and G. J. Ackland, Philos. Mag. Lett. **87**, 349 (2007).