

# USO DEL EMBEDDED ATOM MODEL PARA EL ESTUDIO DE DEFECTOS MICROESTRUCTURALES

S. R. de Debiaggi

*Departamento de Física, Universidad Nacional del Comahue  
Buenos Aires 1400, 1300 Neuquén y CONICET.*

y A. M. Monti

*Departamento Materiales, Gerencia Desarrollo  
Comisión Nacional de Energía Atómica  
Av. Libertador 8250, 1429 Buenos Aires.*

Se estudiaron propiedades de sistemas metálicos puros como el Ni, Al y la aleación Ni<sub>3</sub>Al, en presencia de una vacancia.

Dichos sistemas fueron cohesionados mediante un potencial interatómico del tipo de Embedded Atom, modelo que fuera propuesto recientemente por Daw y Basques<sup>1</sup>, como una mejora sustancial respecto de los tradicionales potenciales de pares.

Específicamente se analizó la vacancia en sus configuraciones de equilibrio y de punto de ensilladura, evaluando las energías de formación y de migración de este defecto, y se calcularon entropías vibraciones en redes defectuosas cohesionadas con estos potenciales.

## INTRODUCCION

La simulación por computadora de las propiedades a escala atómica de sistemas metálicos complejos ha captado la atención de los investigadores dedicados al estudio de la materia condensada.

Los resultados obtenidos en este campo se ven influenciados directamente por la calidad del potencial interatómico utilizado, existiendo actualmente enorme interés por el desarrollo de potenciales precisos<sup>2</sup>.

El Embedded Atom model (EAM), es un modelo propuesto recientemente por Daw y Basques<sup>1</sup> y también por Finnis y Sinclair<sup>3</sup>, que incorpora de una manera sencilla el carácter de n-cuerpos a los potenciales de pares.

En el EAM la energía del sistema se compone de un término de pares, más un término por cada átomo ("energía de embebido") que es una función de la densidad electrónica local que el átomo percibe como consecuencia de sus vecinos cercanos. De esta manera el EAM logra eliminar, a un costo computacional accesible, deficiencias inherentes a los potenciales de pares tales como la conocida discrepancia de Cauchy y el dilema energía de cohesión-energía de formación de una vacancia, siendo adecuado para el tratamiento de regiones defectuosas.

El potencial de Embedded Atom utilizado es un ajuste particular desarrollado por Voter<sup>4</sup>, con el cual se simulan diferentes configuraciones de la vacancia en la aproximación de Einstein.

## PROCESO DE SIMULACION

Se utilizó un programa Fortran que incorpora el código Devil desarrollado por Norgett<sup>5</sup>, el cual permite minimizar la energía de un sistema cristalino con defectos.

Los átomos del cristal simulado se vinculan a través del EAM<sup>4</sup>, el que reproduce las propiedades de volumen del material estudiado y las propiedades de las respectivas moléculas diatómicas.

El cristal se divide en dos zonas: la zona I (interna) en la cual los átomos relajan sus coordenadas en presencia de defectos, usando para ello el método de los gradientes conjugados; y la zona II (externa), a la que se le impone la condición de contorno rígido.

Se trabajó aquí con redes de 864 átomos en la zona I, y un total de 5324 átomos.

## RESULTADOS

### — Configuración de equilibrio de una vacancia: Ni, Al y Ni<sub>3</sub>Al.

Las energías de formación de una vacancia, constituyen variables de ajuste del potencial. Nuestros cálculos reprodujeron idénticos resultados a los reportados en<sup>4</sup>.

Los desplazamientos inducidos en las capas vecinas a la vacancia se muestran en las fig. 1a) y b) para Ni y Al.

Estos desplazamientos no se determinan experimentalmente y por lo tanto no es posible contrastar los resultados obtenidos. Comparando con lo que

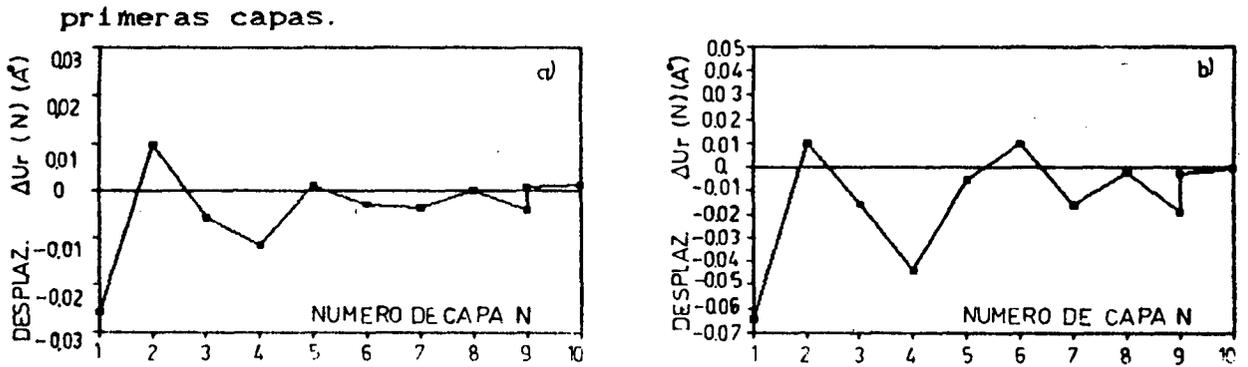


Figura 1: Desplazamientos radiales en torno a la vacancia. a) Ni. b) Al.

se obtiene para el Al a partir de una simulación basada en la estructura electrónica del cluster<sup>6</sup>, existe un notable acuerdo para los desplazamientos de las primeras capas.

En el caso de la aleación, para la vacancia de Ni vemos que se produce un desdoblamiento de las capas como consecuencia de su carácter mixto, notándose para los átomos de Al de la 1ra. capa un desplazamiento muy superior al de los átomos de Ni en dicha capa (Fig. 2). Esto se debe a que los átomos de Al están comprimidos en la aleación ya que el parámetro de red del Al puro es un 12% mayor que el que corresponde a la aleación; éste apenas supera en un 1.5% al de Ni puro.

En algunas capas formadas sólo por átomos de Ni también hay desdoblamiento, debido a la diferente simetría que los átomos presentan con respecto a los de Al.

Los desdoblamientos no se observan en la aleación para la vacancia de Al pues en ese caso las capas vecinas están formadas por el mismo tipo de átomos.

— Energía de migración de una vacancia.

La migración de la vacancia fue estudiada utilizando, en la técnica de simulación por computadora, el procedimiento usual para tales fines, tal como se indica en<sup>7</sup>.

Se obtuvieron los siguientes valores de energías

de migración en el metal puro:  $E_{m, Ni} = .99$  eV,  $E_{m, Al} = .3$  eV; los respectivos valores experimentales son 1.3 eV<sup>8</sup> y 65 eV<sup>9</sup>.

En la configuración activada los primeros vecinos del átomo migrante sufren un desplazamiento promedio de 16 Å, tanto en el Ni como en el Al.

En el caso de la aleación tenemos dos tipos de salto posibles, según se conserve o no el orden de la estructura<sup>10</sup>. La aleación Ni<sub>3</sub>Al en su fase L12 puede interpretarse como 4 redes cúbicas simples interpenetrantes, 3 subredes de Ni (α), y una subred de Al (β). En la red ordenada los sitios α y β son ocupados por átomos A y B respectivamente.

El Ni tiene dos posibilidades de saltos a primeros vecinos<sup>10</sup>: el salto α - α, en el que un átomo de Ni intercambia su posición con una vacancia de Ni y por otro lado el salto α - β, en el que lo hace con una vacancia de Al. El caso α - α conserva el orden de la estructura. El caso α - β lo destruye locamente incrementando la energía del sistema en .14 eV.

Las energías de migración calculadas:  $E_{m, \alpha-\alpha} = 1.14$  eV y  $E_{m, \alpha-\beta} = .95$  eV, acuerdan razonablemente con el valor experimental obtenido por Doyama<sup>11</sup>:  $E_m = 1.12$  eV.

En la configuración activada correspondiente al salto α - α los primeros vecinos del átomo migrante sufren diferentes desplazamientos según su naturaleza, los de tipo α se desplazan en .21 Å, y los de

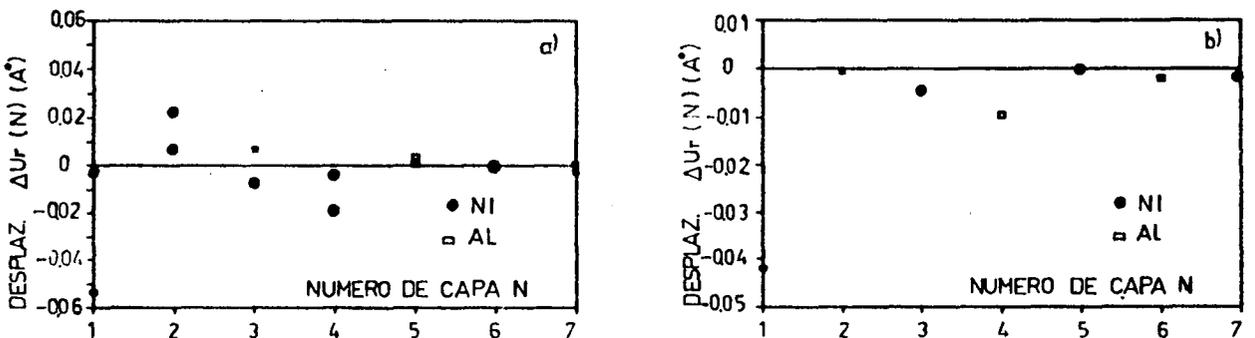


Figura 2: Desplazamientos radiales en torno a la vacancia en Ni<sub>3</sub>Al. a) Vacancia de Ni. b) Vacancia de Al.

tipo  $\beta$  lo hacen en .11 Å; mientras que para el salto  $\alpha - \beta$  los primeros vecinos, todos de Ni, se desplazan en .15 Å.

El Al solo puede migrar a primeros vecinos por un salto de tipo  $\beta - \alpha$  equivalente al  $\alpha - \beta$  descripto.

A segundos vecinos puede migrar exclusivamente en la subred de Al, pero las energías involucradas calculadas en el presente trabajo son elevadas:  $E_{m,\alpha-\beta} = 4.65$  eV.

#### — Entropía de formación de una vacancia.

Se inicia con éste trabajo el estudio de entropías vibracionales  $S_v$  asociadas a defectos en redes cohesionadas con EAM. La evaluación de  $S_v$  requiere el cálculo de las autofrecuencias de la red perfecta y de la red defectuosa, que puede hacerse ya sea en la aproximación de Einstein o en la del determinante<sup>7</sup>.

Trabajos reportados en la literatura hasta el presente utilizan potenciales interatómicos de pares<sup>12</sup>. La diferencia entre dichos trabajos y el presente radica en que el EAM impone términos de largo alcance<sup>3</sup>, que deben ser incluidos para la obtención de las matrices de constantes de fuerza cuyos autovalores son las autofrecuencias vibracionales.

Utilizando el EAM en la aproximación de Einstein en la red sin relajar se obtuvo para la formación de la vacancia en el metal puro  $S_{v,Ni} = 1.80$  k y  $S_{v,Al} = 1.99$  k.

#### DISCUSION

Los resultados obtenidos aplicando este modelo de embedded atom para el estudio de una vacancia fueron en general satisfactorios.

Los valores de energías de migración calculadas provienen de efectuar la simulación de la red con el defecto en su configuración de ensilladura, utilizando potenciales interatómicos que sólo están ajustados a propiedades de equilibrio de la red. Esta limitación explica que los valores de energías de migración calculados, en particular en el metal puro, no muestran una mejor coincidencia con los valores experimentales.

En cuanto a la migración en la aleación ordenada cabe destacar que la energía de activación, dada por la suma de las energías de formación y de migración de una vacancia, calculada para el salto

$\alpha - \beta$ :  $E_{act} = 2.76$  eV, (1.76 + 1.14 eV), es comparable con la del salto  $\alpha - \alpha$ :  $E_{act} = 2.74$  eV, (1.79 + 0.95 eV). Esto indica, en acuerdo con Bakker<sup>10</sup>, que dichos saltos debieran también ser considerados, a diferencias de otras hipótesis según las cuales la migración se produciría a través de la misma subred. Dichos saltos resultan relevantes en el mecanismo de migración por anillos; secuencia particular de saltos durante la cual si bien puede aumentar la energía, ésta es restituída al finalizar la secuencia y restaurarse el orden.

Respecto al cálculo de las entropías no se dispone de información experimental clara que permita verificar nuestros resultados. El siguiente paso en este tema será incluir la relajación de la red y la contribución de los modos colectivos de vibración, la que provee una mejor aproximación al cálculo de  $S_v$ .

#### REFERENCIAS

1. Basques M., Daw M., Dodson B., Foiles S., MRS Bull., Feb. 1988.
2. Daw M., Basques M., Phys. Rev. Lett. 50, 1285 (1982).
3. Finnis M., Sinclair J., Phil. Mag. A 50, N° 1, 45 (1984).
4. Voter A. F., Chen S. P., Mat. Res. Soc., Boston, 82, 175 (1987).
5. Norgett M., Perrin R. y Savino E., J. Phys. F 2, 173 (1972).
6. Caro A., Victoria M. y R. de Debiaggi S., preprint.
7. Monti A. M. y Savino E. J., Phys. Rev. B 23, 6494 (1981).
8. Wycisk M. and Zeller-Kniepmeier M. Jr. Nuc. Mat. 70, 616 (1978).
9. Schule W. y Schoz R., "Point Defects and Defect Interactions in Metals", ed. by Takamura J., Doyama M. y Kiritani M., North Holland (1982) p. 257.
10. Bakker H., Materials Science Forum, vol. 15-18, 1115 (1987).
11. Doyama M., Wang M., Schimotomai M. and Iwata T., Materials Science Forum, vol. 15-18, 1305 (1987).
12. Hatcher R. D., Zeller R. and Dederichs P. H., Phys. Rev. B 19, 10 (1979).