

ESTUDIO ATOMISTICO DE INTERFASES EN EL SISTEMA Al-Mo

ATOMISTIC STUDY OF INTERFASES IN THE Al-Mo SYSTEM

M. I. Pascuet^{(1,3)*}, J. R. Fernández^(1,2) y A. M. Monti⁽²⁾

⁽¹⁾CONICET

⁽²⁾UNIDAD DE ACTIVIDAD DE MATERIALES, CENTRO ATÓMICO CONSTITUYENTES, CNEA
AV. DEL LIBERTADOR 8250 – BUENOS AIRES – ARGENTINA

⁽³⁾CICLO BÁSICO COMÚN - UBA

e-mail : pascuet@cnea.gov.ar

Se estudia la estructura y energética de interfases en el sistema Al-Mo mediante técnicas de simulación por computadora. Dichas interfases tienen particular interés tecnológico en relación al desarrollo de elementos combustibles de muy alta densidad, ya que éstos pueden fabricarse colaminando una aleación de U-Mo con Al. Inicialmente, se lleva a cabo un ajuste geométrico de la interfase a fin de obtener una aproximación a la configuración energéticamente más favorable. En segundo término se permite la relajación atomística a nivel local de la configuración, a fin de obtener la mínima energía. Se utiliza un potencial de muchos cuerpos, del tipo átomo embebido, ajustado a ciertas características del sistema Al-Mo.

Palabras Claves: Al-Mo, interfases, fcc/bcc, fcc/intermetálico, simulación atomística, estática molecular.

The structure and energetics of interfases in the Al-Mo system is studied using computer simulation techniques. Such interfases have a particular technological interest in the development of high density fuel elements, as they can be fabricated by colaminating a U-Mo alloy with Al. Initially, a geometric fitting is performed to obtain an approximation of the energetically most favorable configuration. Then, a local atomistic relaxation is allowed to obtain the minimum energy. The interatomic potential used, of embedded atom type, has been fitted to some characteristics of the Al-Mo system.

Key Words: Al-Mo, interphase boundaries, fcc/bcc, fcc/intermetallic, atomistic simulation, molecular statics.

I. INTRODUCCIÓN

La aleación U-Mo es uno de los materiales propuestos para la fabricación de combustibles nucleares de alta densidad de U de bajo enriquecimiento⁽¹⁾. Actualmente, está en estudio su aplicación en combustibles dispersos tipo placa⁽²⁾. Durante la fabricación y servicio de dichos combustibles se produce interdifusión y formación de otras fases en la superficie de unión del U-Mo con la matriz de Al⁽¹⁻⁴⁾. Por lo tanto, es necesario estudiar los procesos que ocurren en la interfase con el objeto de inhibir la difusión para evitar o retardar la formación de estas fases intermedias.

En muchas transformaciones de estado sólido, la fase nucleada crece siguiendo una relación de orientación cristalográfica definida con la matriz y las interfases generadas adoptan determinados 'planos de hábito'. Aunque las interfases que se estudian en el presente trabajo no surgen como resultado de este tipo de transformaciones, puede suponerse que las mismas estarán presentes en la distribución de orientaciones del material bajo estudio.

A partir de la evidencia experimental, se han enunciado varios criterios geométricos simples, basados en coincidencias estructurales, que permitirían determinar la interfase de menor energía^(5,6). La idea

fundamental es que, regiones interfaciales en donde existe correspondencia estructural entre ambas fases no implican grandes desplazamientos atómicos, mientras que en las regiones fuera de registro existirá una distorsión grande de ambas redes. Éste último caso, contribuirá a elevar la energía superficial. El modelo de red de sitios coincidentes⁽⁷⁾ (SC), muy utilizado para estudiar bordes de grano en redes cúbicas, se basa en este criterio: si se superponen dos redes α y β de igual estructura, que conservan una dada relación de orientación entre ellas y que poseen un origen común, la red de sitios coincidentes queda definida por los sitios que son comunes a ambas redes. Por lo dicho anteriormente, los planos que contienen una gran densidad de sitios coincidentes serán buenos candidatos para ubicar un borde de grano de baja energía. Cuando las dos redes α y β difieren en estructura y/o parámetro de red, en general se tendrán pocas coincidencias pero existirán muchos sitios de α y β que serán cercanos entre sí. Éstos sitios constituyen la red de sitios casi coincidentes (SCC). De la misma manera que con la red de SC, se espera que un plano de interfase que contenga una gran densidad de SCC poseerá baja energía⁽⁶⁾.

Debido a que se carece de la información necesaria para representar la fase U- γ (bcc) se toma a la aleación Al-Mo como sistema fcc-bcc modelo. En el presente trabajo se estudia la estructura y energética de algunas de las interfases que pueden generarse en dicho sistema. Estos estudios son parte de una línea de investigación

* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia

más general, tendiente a obtener la mejor descripción posible de las interacciones atómicas en el sistema (U,Mo)-Al. El estudio se realiza construyendo inicialmente las estructuras sugeridas por la red de SCC y luego se efectúa la simulación con técnicas de estática molecular como se indica más adelante.

Se estudian las dos interfases Al(fcc)/Mo(bcc) y Al(fcc)/Al₃Mo(r). El Al₃Mo(r) es un intermetálico estable a bajas temperaturas que posee estructura romboédrica⁽⁸⁾. Experimentalmente, la interfase Al/Mo no es estable, puesto que cuando se la somete a un tratamiento térmico, permitiendo la interdifusión entre Al y Mo, da origen a varias de las fases intermetálicas de equilibrio^(9,10). Por otro lado, la interfase Al(fcc)/Al₃Mo(r) se encuentra en las partículas del intermetálico que se forman en la superficie del Al, cuando se alean partículas de Mo con ayuda de un laser⁽¹¹⁾.

Existen estudios teóricos de deposición de Al sobre las superficies Mo(100) y Mo(110) utilizando el método BFS⁽¹²⁾. Dicho método de cálculo da tendencias referentes a la mezcla atómica a nivel superficial, pero no considera las diferencias estructurales entre Al y Mo, la posible formación de compuestos intermetálicos ni la relajación de la red cristalina, que pueden tener efectos importantes. Uno de los objetivos del presente trabajo es poner énfasis en estos últimos aspectos de la aleación estudiada.

En la sección siguiente se detalla el procedimiento de cálculo seguido en las simulaciones. Las secciones III y IV describen en detalle cómo se seleccionaron las orientaciones de los planos cristalinos que forman la interfase para los casos Al(fcc)/Mo(bcc) y Al(fcc)/Al₃Mo(r). Además, se analizan las estructuras relajadas que se obtuvieron y se reportan las respectivas energías de interfase. La última sección enumera algunas conclusiones que pueden extraerse de los cálculos realizados.

II. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

Para calcular la energía interfacial, se minimiza la energía configuracional de una celda de simulación bicristalina entre dos fases α y γ que forman una interfase α/γ . Dicha celda se genera de la siguiente manera: i) se construyen los dos cristales α y γ con su correspondiente estructura, ii) se orienta una estructura respecto de otra de la forma deseada, iii) se cortan cada uno de los bloques en sendas superficies planas paralelas que luego se enfrentan, formando la interfase.

Las condiciones de contorno más apropiadas para simular un defecto bidimensional consisten en aplicar condiciones de borde rígido (los átomos permanecen fijos en sus posiciones de equilibrio de red perfecta) en la dirección perpendicular al plano del defecto y condiciones periódicas a lo largo de dicho plano. Sin embargo, las condiciones periódicas de borde exigen que los planos cristalográficos de ambas estructuras sean *conmensurables*, es decir, deben existir un par de

vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} , no paralelos entre sí, que sean vectores de red de ambos cristales y que permitan describir la periodicidad bidimensional de la estructura. Es claro que la longitud de dichos vectores debe ser mínima para que la celda de simulación posea la menor cantidad de átomos posible. En general, las orientaciones aplicadas entre las fases estudiadas en este trabajo producen interfases *incommensurables*, lo cual impide aplicar estrictamente condiciones de borde periódico en el plano del defecto bajo un borde rígido en la dirección perpendicular. Se puede forzar la conmensurabilidad deformando la red a lo largo del plano de la interfase, a costa de generar un pequeño campo de tensiones σ que se extiende hacia el volumen. La magnitud de dicho campo σ será mayor cuanto mayor sea la falla de conmensurabilidad de ambas redes⁽¹³⁾. Parte de esta tensión puede eliminarse si se liberan los extremos superior e inferior de la celda de manera que se generen superficies libres. La celda de simulación contendrá, entonces, tres defectos extendidos: dos superficies libres y la interfase deseada. Éstas son las condiciones adoptadas para todas las simulaciones realizadas en este trabajo.

La energía de exceso E_e debido a la existencia de la interfase se calcula mediante:

$$E_e = \frac{1}{A} (E_T - \sum_{j\alpha} N_{j\alpha} E_c^{j\alpha}) \quad (1)$$

donde A es el área de la interfase, E_T la energía del bloque de simulación, y $N_{j\alpha}$ y $E_c^{j\alpha}$ el número de átomos y la energía de cohesión correspondientes a la especie química j en la fase α . La energía E_e posee dos contribuciones: la energía elástica E_σ , consecuencia del campo de tensiones σ , y la energía interfacial E_I . La energía E_σ crece linealmente con el número de capas atómicas m de cada fase, próximas a la interfase, que se incluyen en el cálculo. Por lo tanto, la energía interfacial E_I puede obtenerse de la energía E_e realizando la extrapolación $m \rightarrow 0$ ⁽¹³⁾.

Para cada una de las interfases estudiadas, se han investigado varias orientaciones del plano del defecto. Siguiendo los conceptos de la red de SCC, se tomaron aquellos planos que maximizan la densidad superficial de SCC. La metodología adoptada para cada caso se detalla en las secciones siguientes.

Los potenciales utilizados para representar las interacciones atómicas son del tipo *átomo embebido* (EAM). Los correspondientes al Al⁽¹⁴⁾ y Mo⁽¹⁵⁾ puros se han extraído de la literatura. La interacción atómica Al-Mo se ajusta al parámetro de red y energías de formación del intermetálico AlMo₃, fase cúbica estable a bajas temperaturas⁽¹⁶⁾. Los detalles del método de ajuste se pueden encontrar en trabajos anteriores^(17,18). Este potencial ya ha sido utilizado en el cálculo de propiedades de defectos puntuales en el mismo intermetálico AlMo₃⁽¹⁸⁾.

III. INTERFASES ESTUDIADAS

Interfase Al(fcc)/Mo(bcc)

En varios sistemas metálicos fcc-bcc (Cu-Zn, Ni-Cr, Cu-Cr, algunos aceros, etc.) se observa que existen relaciones de orientación definidas entre las fases α (bcc) y γ (fcc):

a) Kurdjumov-Sachs (KS):

$$(110)_{\alpha} // (111)_{\gamma} ; [1\bar{1}1]_{\alpha} // [1\bar{1}0]_{\gamma} \quad (2)$$

b) Nishiyama-Wasserman (NW):

$$(110)_{\alpha} // (111)_{\gamma} ; [00\bar{1}]_{\alpha} // [01\bar{1}]_{\gamma} \quad (3)$$

Las dos relaciones de orientación son muy próximas entre sí y difieren sólo en una rotación de unos 5.25° . A continuación, se muestran los estudios realizados sobre la interfase que resulta cuando se ponen en contacto las estructuras del Al y Mo con la relación de orientación NW, ec. (3). Los valores del parámetro de red para dichos materiales son $a_{Al}=4.05\text{\AA}$ y $a_{Mo}=3.15\text{\AA}$.

Como ya se ha mencionado, se puede determinar la estructura de la interfase Al/Mo utilizando modelos que se basan en el ajuste geométrico de los planos cristalinos en contacto^(19,20). Sobre la base de la red de SCC, Aaronson y col.⁽¹⁹⁾ hallaron que, si se agregan escalones monoatómicos sobre los planos compactos definidos por la ec. (3), se puede incrementar sensiblemente la proporción de área coherente sobre la interfase. Esto produce una desviación del plano de hábito aparente respecto de la orientación $(110)_{Mo} // (111)_{Al}$, que concuerda con lo observado experimentalmente en otras aleaciones.

Para hallar la red de SCC i) se superponen las redes bcc del Mo y fcc del Al de manera que sus orígenes coincidan, ii) se rota la red del Mo respecto a la del Al utilizando la siguiente expresión de la matriz de rotación:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1+c(u^2-1) & cuv-sw & cuw+sv \\ cuv+sw & 1+c(v^2-1) & cvw-su \\ cuw-sv & cvw+su & 1+c(w^2-1) \end{pmatrix} \quad (4)$$

donde $c=1-\cos\phi$, $s=\sin\phi$, $[u,v,w]$ es el versor que indica el eje de rotación y ϕ el ángulo de rotación, y iii) se hallan los sitios cuya distancia es menor a $0.1a_{Al}$. La relación de orientación NW puede lograrse de varias maneras diferentes si se consideran las distintas simetrías de las redes fcc y bcc en la matriz \mathbf{R} (variantes cristalográficas⁽²¹⁾). En este trabajo, hemos utilizado los valores de u,v,w y ϕ que surgen directamente de las relaciones entre los planos y las direcciones dados por los índices de la ec. (3):

$$[u,v,w] = [0.9761203, -0.0831305, 0.2006949];$$

$$\phi = 45.9876^{\circ}$$

La figura 1 muestra un corte de la red de SCC formada por las estructuras del Mo y el Al al aplicar la rotación \mathbf{R} definida por la ec. (5). El plano del corte, que llamaremos I_1 , pasa por el origen común de ambas redes y es paralelo a los planos compactos $(110)_{Mo} // (111)_{Al}$. En este plano I_1 , la red de SCC está compuesta por grupos de sitios distribuidos en una red casi hexagonal. Es posible incrementar la cantidad de SCC que pasan

por el plano de corte si se rota dicho plano alrededor de las direcciones más compactas de estos grupos de SCC, es decir, las direcciones $[0\bar{1}1]_{Al}$ y $[911\bar{0}]_{Al}$. La figura

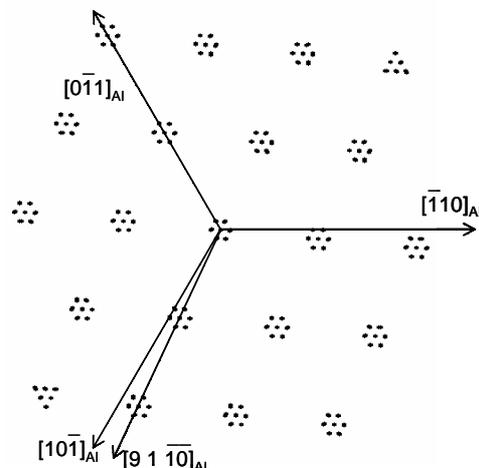


Figura 1: Corte I_1 de la red de SCC generada por las estructuras del Mo y Al para la relación de orientación NW, según los planos $(110)_{Mo} // (111)_{Al}$. Las direcciones se refieren a la red del Al.

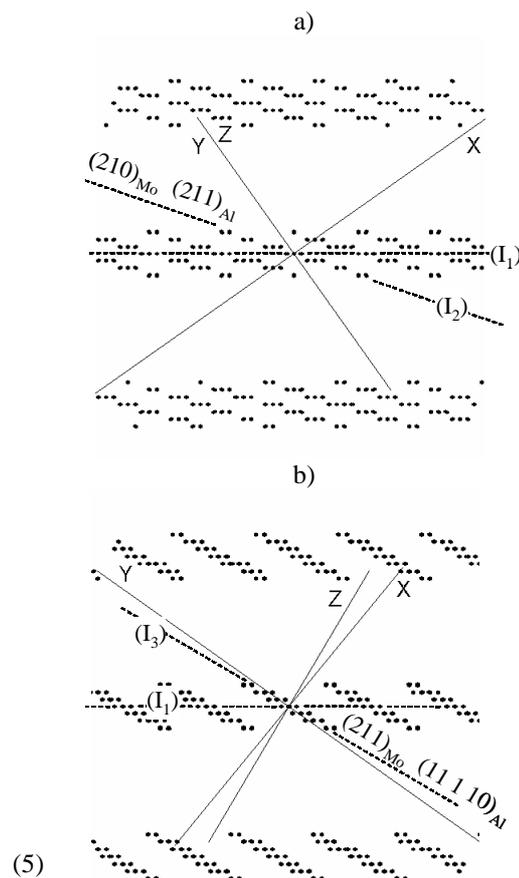


Figura 2: Proyecciones de la red de SCC correspondiente a la fig. 1 en distintas direcciones: a) proyección $[0\bar{1}1]_{Al}$; b) proyección $[911\bar{0}]_{Al}$. Las líneas de trazos I_1 (planos $(110)_{Mo} // (111)_{Al}$), I_2 e I_3 indican las trazas de las interfases estudiadas. Los ejes X,Y,Z se refieren a la celda cúbica del Al.

2 muestra las proyecciones de la red de SCC a lo largo de cada una de estas direcciones. La línea de trazos horizontal muestra el corte I_1 (fig. 1). La densidad de SCC se incrementa si se rota el plano de corte alrededor de las direcciones de proyección hasta las posiciones I_2 ó I_3 indicadas. Si la interfase pasa por los planos I_2 ó I_3 , su estructura estará formada por terrazas paralelas a I_1 , planos compactos $(110)_{Mo} // (111)_{Al}$, separadas por escalones en la dirección del eje de rotación. Esta estructura concuerda con el resultado hallado por otros autores⁽¹⁹⁾. Obsérvese que los grupos de SCC abarcan una cierta extensión a lo largo de las líneas I_2 ó I_3 en donde la interfase resulta coherente. Entre estas zonas, no existe coherencia entre ambas estructuras lo cual dará origen a dislocaciones de desajuste a lo largo del eje de proyección. El análisis de tales dislocaciones excede los objetivos de este trabajo y solamente se estudiará la porción coherente de estas interfases.

A partir de estas estructuras, se hallaron las direcciones y planos cristalográficos en cada fase y, finalmente, se construyeron celdas de simulación para calcular la energía superficial E_1 utilizando el potencial EAM ajustado para el sistema Al-Mo.

Plano de corte I_1

La figura 3 muestra los tres primeros planos compactos $(111)_{Al}$ de la estructura relajada de la interfase generada por el corte I_1 . Normalmente, los planos (111) de la estructura fcc siguen la secuencia ...ABCABC..., la cual es observada en ciertas regiones de la interfase, mientras que en otras es ...ABABAB..., correspondiente a la estructura hcp. Estas últimas regiones constituyen fallas de apilamiento que se forman durante la relajación. El límite entre ambas regiones (indicado aproximadamente por las líneas de trazos) son líneas de dislocación imperfectas con vectores de Burgers de la forma $a/6 \langle \bar{1} \bar{1} 2 \rangle_{Al}$. Los átomos de Mo, ligados más fuertemente entre sí, sufren desplazamientos comparativamente despreciables y expulsan la deformación hacia el Al. Por esta causa, el campo de deformación de las dislocaciones está casi íntegramente contenido en la red cristalina del Al.

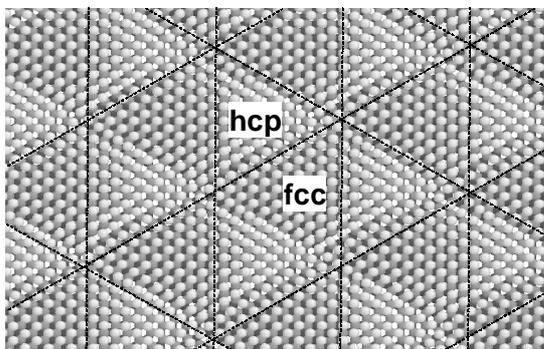


Figura 3: Proyección sobre el plano $(111)_{Al}$ de la estructura relajada de la interfase generada por el corte I_1 (fig. 2). Se muestran sólo los tres primeros planos $(111)_{Al}$ en distintos tonos de gris: los círculos más claros (oscuros) representan átomos más próximos (alejados) a la interfase. “fcc” y “hcp” indican zonas que poseen dicha estructura. Las líneas de a trazos señalan la ubicación aproximada de las dislocaciones parciales.

Plano de corte I_2

La interfase generada a partir del plano de corte I_2 se muestra en la figura 4. La estructura de esta interfase es escalonada y está compuesta por terrazas que siguen los planos compactos de ambas fases y escalones a lo largo de la dirección $[00\bar{1}]_{Mo} // [0\bar{1}1]_{Al}$ (figura 4-a). Si la estructura se rota 90° alrededor de un eje perpendicular al plano I_2 , pueden observarse dos dislocaciones parciales con una falla de apilamiento que es paralela al plano de las terrazas (figura 4-b).

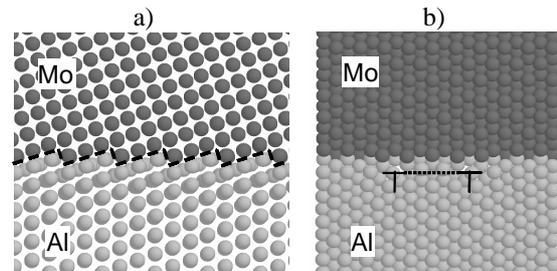


Figura 4: a) Proyección $[0\bar{1}1]_{Al}$ de la interfase generada según el corte I_2 . b) Proyección de la misma estructura en la dirección $[\bar{1}11]_{Al}$.

Plano de corte I_3

Finalmente, la interfase generada a partir del plano de corte I_3 se muestra en la figura 5. Como en los casos anteriores, también se observan dislocaciones en la estructura relajada (fig. 5-c). No ha podido hallarse evidencia de fallas de apilamiento vinculadas a dichas dislocaciones. El desajuste entre las redes del Al y Mo impone la existencia de dislocaciones perfectas con vector de Burgers de la forma $a/2 \langle 01\bar{1} \rangle_{Al}$.

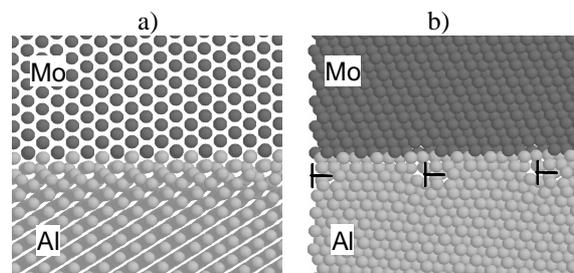


Figura 5: Estructura de la interfase generada por el plano de corte I_3 : a) proyección $[9\bar{1}\bar{1}]_{Al}$, b) proyección $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_{Al}$.

En las tres interfases estudiadas, las longitudes de periodicidad **a** y **b** resultantes de la simulación corresponden a valores de equilibrio entre las estructuras del Al y Mo. Como se ha mencionado en la Sección II, este equilibrio genera tensiones en cada una de las fases. Cuando se sustrae la energía elástica E_σ de la energía total E_e , realizando la extrapolación $m \rightarrow 0$, se obtienen las energías que se muestran en la Tabla I. El signo negativo de estas energías refleja la inestabilidad

de la interfase Al/Mo. Este resultado sugiere que los potenciales favorecen la formación de compuestos intermetálicos frente a las fases originales, Al y Mo.

Tabla I: Energías interfaciales E_1 (en mJ/m^2) para las estructuras estudiadas. I_i corresponden a los cortes indicados en las fig. 1 y 2, y θ es el ángulo entre direcciones compactas en los planos (111) de Al y (0001) de $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$.

Al/Mo		Al/ $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$		
plano	E_1	θ	plano	E_1
I_1	-330	0°	Al puro	360
I_2	-430		Al-Mo	-240
I_3	-230	30°	Al puro	550
			Al-Mo	50

Interfase Al(fcc)/ $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$

En el tratamiento superficial por láser de una aleación Al-Mo, Almeida y col.⁽¹¹⁾ hallaron que la interfase Al/ $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ de las partículas de intermetálico que se forman poseen un plano de hábito (0001) en la fase $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$. La fase $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ es un intermetálico estable a bajas temperaturas que posee estructura romboédrica⁽⁸⁾. Su estructura se compone de bloques del tipo Al_5W apilados según la secuencia ...ABCABC... (ver figura 6). Se utilizará el sistema hexagonal (Miller-Bravais) para la descripción de índices de direcciones y planos cristalográficos en esta estructura. A continuación, se presentan los resultados hallados en el estudio de dicha interfase.

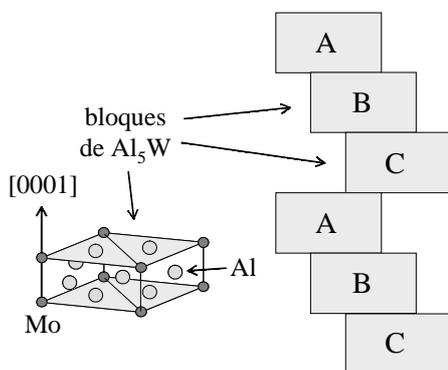


Figura 6: Esquema de apilamiento de bloques del tipo Al_5W para formar la estructura $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$. Obsérvese que el intermetálico puede terminar en Al puro o en una composición 50%Al-50%Mo al exponer un plano compacto (0001).

La información experimental disponible no es suficiente para definir tanto la relación de orientación entre las dos fases como la orientación del plano de la interfase. Además del plano expuesto por la fase $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ es necesario conocer, por ejemplo, el plano cristalográfico correspondiente a la matriz de Al y la orientación relativa entre ambos planos. Por otro lado, las dos terminaciones diferentes del plano compacto

(0001) en el $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ (Al puro o 50%Al-50%Mo) producirán dos interfasas de distinta estructura.

De acuerdo al modelo de SCC mencionado anteriormente, la interfase de mayor coherencia corresponderá al plano cristalográfico que posea la mayor densidad de SCC. Puesto que el plano (0001) de la fase $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ ya está fijado por la observación experimental, debe hallarse el plano (hkl) de la red del Al, y la posición relativa de éste con respecto al primero, que genere la mayor densidad de SCC. La figura 7 muestra las densidades de SCC para los tres planos más compactos del Al en función del ángulo de desorientación θ entre direcciones más compactas. Se observa que las mayores densidades ocurren cuando los planos (111) y (0001) son paralelos.

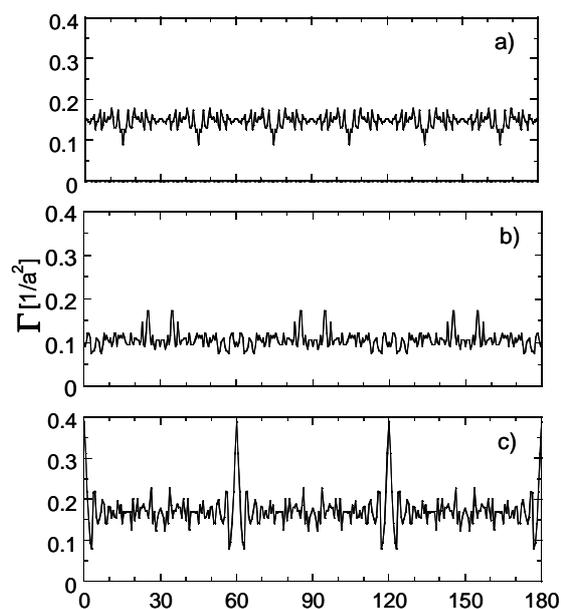


Figura 7: Densidad de sitios casi coincidentes Γ sobre la interfase Al(fcc)/ $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ (expresada en número de sitios por a_{Al}^2) en función del ángulo de desorientación θ (en grados) entre direcciones más compactas y para tres planos cristalográficos (hkl) diferentes: a) (001), θ : ángulo entre $[110]$ y $[11\bar{2}0]$; b) (011), θ : ángulo entre $[01\bar{1}]$ y $[11\bar{2}0]$; y c) (111), θ : ángulo entre $[01\bar{1}]$ y $[11\bar{2}0]$; En todos los casos, el plano interfacial del intermetálico $\text{Al}_5\text{Mo(r)}$ es el (0001).

Para este par de planos se simuló dos orientaciones relativas: la de máxima densidad, que resulta cuando las dos direcciones compactas $[01\bar{1}]$ y $[11\bar{2}0]$ son paralelas ($\theta=0^\circ$), y otra intermedia para la cual $\theta=30^\circ$. En todos los casos se observan dislocaciones asociadas a la interfase. Las energías E_1 calculadas para ambos casos y para las dos terminaciones del plano (0001) se dan en la Tabla I.

IV-CONCLUSIONES

En todas las interfases estudiadas se observan dislocaciones en la red del Al, mientras que la otra fase sufre poca (caso del intermetálico Al₅Mo) o ninguna (caso del Mo) distorsión. Las interacciones más energéticas Al-Mo y Mo-Mo, comparadas con la interacción Al-Al, son la causa de la diferencia entre los campos de desplazamiento entre las dos fases. Tal diferencia puede atribuirse a los mayores valores de energía de cohesión, constantes elásticas, etc. del Mo con respecto al Al.

La inconmensurabilidad entre las estructuras que forman las interfases estudiadas induce la aparición de tensiones en el seno de las fases que contribuyen a la energía interfacial. Tales contribuciones, aunque pequeñas, conducen a una variación lineal de la energía interfacial con el volumen de las fases considerado en el cálculo.

Respecto del signo de las energías interfaciales calculadas, éstas resultan todas negativas en el caso Al/Mo y mayormente positivas para Al/Al₅Mo(r), indicando la inestabilidad de la primera respecto a la formación de intermetálicos. Este resultado concuerda con la evidencia experimental hallada en la literatura^(9,10,11) y otorga cierta confiabilidad a los potenciales utilizados.

V- AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se realizó con el apoyo parcial de los proyectos PIP-5062 (CONICET) y A-C032 (UNSAM).

VI- REFERENCIAS

- 1- M. K. Meyer, G. L. Hofman, S. L. Hayes, C. R. Clark, T. C. Wiencek, J. L. Snelgrove, R. V. Strain y K. H. Kim, *J. Nucl. Mater.* 304, 221 – 236 (2002).
- 2- Publicaciones de las diferentes reuniones del Programa RERTR (Reduced Enrichment for Research and Test Reactors), <http://www.rertr.anl.gov/index.html>
- 3- D. B. Lee, K. H. Kim y C. K. Kim, *J. Nucl. Mater.* 250, 79 – 82 (1997).
- 4- M. Mirandou, S. Balart, M. Ortiz, M. Granovsky. *J. Nucl. Mater.* 323, 29 – 35 (2003).
- 5- A. P. Sutton y R. W. Balluffi, *Acta metall.* 35, 2177 – 2201 (1987)
- 6- J. K. Chen y W. T. Reynolds, Jr., *Acta mater.* 45, 4423 – 4430 (1997); Q. Liang y W. T. Reynolds, Jr., *Met. Mater. Trans. A* 29, 2059 – 2072 (1998).
- 7- W. Bollmann, “Crystal Defects and Crystalline Interfaces”, Springer-Verlag, Nueva York, 1970.
- 8- J. C. Schuster y H. Ipser, *Metall. Trans. A* 22, 1729 – 1736 (1991).
- 9- M. Kitada y N. Shimizu, *J. Mater. Sci.* 19, 1339 – 1342 (1984).
- 10- R. S. Bushby, K. P. Hicks y V. D. Scott, *J. Mater. Sci.* 31, 4545 – 4552 (1996).
- 11- A. Almeida, F. Carvalho, P. A. Carvalho y R. Vilar, *Surf. Coat. Tech.* 200, 4782 – 4790 (2006).
- 12- J. E. Garcés, A. C. Marino y G. Bozzolo, *The 24th International Meeting on RERTR*, Bariloche, Argentina, Noviembre, 2002.
- 13- J. K. Chen, D. Farkas y W. T. Reynolds, Jr., *Acta mater.* 45, 4415 – 4421 (1997).
- 14- R. Zope y Y. Mishin, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 24102.
- 15- G. Simonelli, R. C. Pasianot y E. Savino, *Phys. Stat. Sol. B* 217 (2000) 747.
- 16- N. Saunders, *J. Phase Equil.* 18 (1997) 370; J. C. Shuster y H. Ipser, *Metall. Trans. A* 22, 1729 – 1736 (1991).
- 17- M. I. Pascuet, J. R. Fernández y A. M. Monti, aceptado para publicarse en los Anales AFA 2005.
- 18- M. I. Pascuet, J. R. Fernández y A. M. Monti, aceptado para publicarse en los Anales de la CONAMET-SAM 2006.
- 19- M. G. Hall, H. I. Aaronson y K. R. Kinsman, *Surf. Sci.* 31, 257 (1972); J. M. Rigsbee y H. I. Aaronson, *Acta metall.* 27, 351 – 363 (1979).
- 20- G. J. Shiflet y J. H. van der Merwe, *Acta metall. mater.* 42, 1189 – 1198 (1994).
- 21- M. Humbert, F. Wagner y C. Esling, *J. Appl. Cryst.* 25, 724 – 730 (1992).