

SIMULACIÓN MONTE CARLO DE LA FORMACIÓN DE AGREGADOS ATÓMICOS EN LAS ALEACIONES MODELO DE TIPO BCC.

Reporte Preliminar

Rojas J. ^(1,2) irojas@ipen.gob.pe; Manrique E. ⁽²⁾ evmc@yahoo.com

(1) Departamento de Física – IPEN / Lima, Perú

(2) Laboratorio de Simulación Computacional – Facultad de Ciencias Físicas – Universidad Nacional Mayor de San Marcos / Lima, Perú

RESUMEN

Mediante la simulación con el método Monte Carlo se realizó una descripción atómica de la estructura de las aleaciones binarias modelo de tipo bcc. Usamos el modelo ABV de la aleación donde se asume la aproximación de interacción par a primeros vecinos con energía de ordenación constante. La dinámica fue introducida por medio de una vacancia que intercambia de lugar con los átomos vecinos más próximos. Las simulaciones fueron realizadas en una red bcc con 128, 1024, 8192 y 16000 sitios, aplicando condiciones de frontera periódicas para evitar efectos de borde. Se determinó las probabilidades de formación de diferentes agregados atómicos $A_{0-m}B_m$ ($m = 0, 1, 2, \dots, 9$) como función de la concentración de los componentes y de la temperatura. Se encontró que en algunas regiones de temperatura y concentración se observa polimorfismo composicional y térmico de los agregados.

Palabras claves: Monte Carlo, orden local, cluster, Algoritmo de Metrópolis

1 INTRODUCCIÓN

Para entender y modificar las propiedades físicas de una aleación es necesario conocer las posibles fases termodinámicamente estables y los mecanismos de transición entre las mismas[1]. Las aleaciones ordenadas como FeAl, son materiales interesantes debido a que poseen propiedades mecánicas únicas y resistencia a altas temperaturas, entre otras propiedades. El problema de identificar las configuraciones atómicas en las soluciones sólidas con orden local es muy difícil usando cálculos desde primeros principios. Por esta razón es de gran interés el desarrollo de diferentes modelos [2,3] y reglas que permitan a partir de información inicial

mínima determinar la estructura y propiedades de aleaciones de cualquier composición.

En el presente trabajo se presentan los estudios realizados mediante la simulación computacional Monte Carlo (MC), acerca del comportamiento de las probabilidades de formación de agregados (PFA) en un amplio intervalo de concentraciones y temperatura.

2 EL MODELO Y LA METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN

Consideramos una aleación binaria como un conjunto de N_A átomos de tipo A y N_B átomos de tipo B, ubicados en los nudos de una red cristalina con N sitios. La red contiene N_V sitios vacíos representando las vacancias en el sistema ($N = N_A + N_B + N_V$). Cada nudo de la red puede estar ocupado por un átomo de cualquier tipo (A o B) o estar vacío, es decir las concentraciones de los átomos y vacancias satisfacen a la condición: $c_A + c_B + c_V = 1$

En el marco de la aproximación de interacción de pares a primeros vecinos, el Hamiltoniano del modelo ABV [4] de aleación binaria se expresa como:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [K s_i^2 s_j^2 + J s_i s_j + U(s_i^2 s_j + s_i s_j^2)] + H_0 \quad (1)$$

donde

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{4}(u_{AA} + u_{BB} + 2u_{AB}) + u_{VV} - u_{AV} - u_{BV} \\ J &= \frac{1}{4}(u_{AA} + u_{BB} - 2u_{AB}) \\ U &= \frac{1}{4}(u_{AA} - u_{BB}) - \frac{1}{2}(u_{AV} - u_{BV}) \end{aligned} \quad (2)$$

u_{xy}^i son las energías de interacción efectiva entre los componentes x, y ; la sumatoria se realiza por todos los vecinos mas próximos de cada sitio. La variable spin s_i toma los valores 1, -1, o 0 si el sitio i es ocupado por una especie del tipo A, B o V respectivamente. H_0 incluye los términos independientes de la configuración microscópica para una aleación dada. El termino U es el responsable del comportamiento de la vacancia. En particular, $U > 0$ significa mayor preferencia de intercambio de la vacancia con el átomo de tipo A. En el caso de $U = 0$, lo cual asumimos en el presente trabajo, la vacancia no tiene ninguna preferencia por un determinado tipo de átomo.

Como mostró Vives [5], en el caso cuando la concentración de las vacancias $c_v \ll 1$, el término K en la ecuación (1) es aproximadamente constante e independiente de la configuración, por tanto el único término relevante es el que contiene J :

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j \quad (3)$$

que es un Hamiltoniano tipo modelo de Ising.

En el presente trabajo utilizamos el modelo estándar ABV, Ec. (3) con una vacancia, para la determinación y descripción de las propiedades en equilibrio de las aleaciones binarias. El signo del parámetro de intercambio J esencialmente determina la tendencia a segregación ($J < 0$) u ordenación química ($J > 0$). Usando el método MC simulamos la colectividad canónica del sistema definido por la Ecuación (3). Toda la dinámica del sistema se introduce mediante el movimiento de una sola vacancia que intercambia de posición con cualquiera de los átomos más próximos con igual probabilidad. De acuerdo al algoritmo estándar de Metrópolis [6], la probabilidad de intercambio de la vacancia con un átomo vecino i escogido aleatoriamente está dada por:

$$P_i = \min \left\{ 1, \exp \left(\frac{-\Delta H}{kT} \right) \right\} \quad (4)$$

donde ΔH es la variación de la energía del sistema al realizar la vacancia un intercambio tentativo de lugar con un átomo vecino.

El espacio de simulación es un cubo que contiene $M = 2L^3$ nudos de una red *bcc* con L celdas por dimensión. En los nudos de esta red se ubican $N = M - 1$ átomos. Con la finalidad de minimizar los efectos de superficie se utilizan condiciones de frontera periódicas en las tres dimensiones. A fin de aclarar la posible dependencia de los efectos de correlación con el tamaño del sistema hemos trabajado con $M = 128, 1024, 8192$ y 16000 sitios. El equilibrio térmico se alcanza, dependiendo del tamaño del sistema, luego de $800 - 2000$ pasos de Monte Carlo (MCS). Los promedios de las magnitudes de interés (probabilidad de formación de agregados, parámetros de corto alcance, energía, etc) se calcularon utilizando $10000 - 20000$ MCS luego del alcanzar el equilibrio termodinámico.

De acuerdo al modelo de las cuasipartículas propuesto por Bogdanovich y Men [7], la aleación está constituida por un conjunto finito de diferentes cuasipartículas o clusters atómicos $A_{n-m}B_m$. Los clusters de n átomos se diferencian por su composición y configuración, y como consecuencia por sus propiedades. En una aleación dada, cada tipo de cluster tiene cierta probabilidad de formación p_k , que depende de la temperatura y concentración de los componentes.

En el marco de este modelo, la propiedad $f(c)$ de la aleación se expresa como,

$$f(c) = \sum_k p_k(c, T) f_k \quad (5)$$

donde $p_k(c, T)$ es la probabilidad de formación (PF) del cluster de tipo k en la aleación de concentración c a temperatura T .

En una primera aproximación suponemos que en el modelo de aleación estudiado, el tamaño de los clusters está limitado solamente por las primeras esferas de coordinación, cuyo alcance se determina, fundamentalmente, por el valor del parámetro J . Por lo tanto en las aleaciones modelo de tipo *bcc* es posible la formación de 10 diferentes tipos de clusters, que se diferencian solo por sus composiciones, tales como: $C0 = A_9B_0, C1 = A_8B_1, \dots$

3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las probabilidades de formación P_k de todos los tipos de clusters ($C0, C1, \dots, C9$) fueron determinados en un amplio rango de

concentraciones y a diferentes temperaturas.

Cada tipo de cluster alcanza su máxima probabilidad de formación en una aleación de composición determinada. La forma de $P_k(c, T = \text{const.})$ y su valor máximo para algunos clusters no varía, mientras que para otros varía sustancialmente como se aprecia en la Fig. 1. A altas temperaturas ($T > T_c$) la distribución de las PF de los clusters es semejante a la distribución estadística.

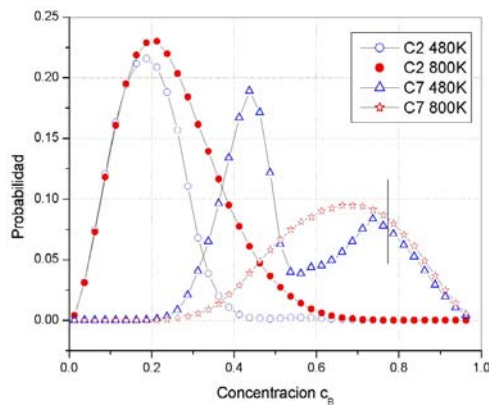


Figura 1. Probabilidades de formación de los clusters C2 y C7 versus concentración a temperaturas 480 y 800K.

A temperaturas cercanas a T_c no solamente se modifica sustancialmente el perfil de la curva de la distribución si no que ocurre un desplazamiento del máximo en el eje de concentraciones. A temperatura 480K, que es menor que la crítica, las PF de los clusters C7 presentan 2 máximos a diferentes concentraciones. En una aleación determinada predominan 2 – 4 tipos de clusters, la población de los otros tipos es casi despreciable.

Las PF de los clusters se determinaron en el rango de temperaturas desde debajo de T_c hasta valores significativamente mayores que el punto crítico. La temperatura se expresa en unidades reducidas, definida como $T_r = kT/J$, donde k es la constante de Boltzman y T la temperatura absoluta.

Como se puede apreciar de la Fig. 2, el comportamiento con la temperatura de las PF de los diferentes tipos de clusters es diferente. Un comportamiento similar de las PF de los clusters se observan en otras aleaciones con composiciones cercanas a las estequiométricas.

Un hecho resaltante es el intercambio de predominio entre ciertos tipos de clusters a

determinados valores de la temperatura. En aleaciones de otras composiciones no se observa ningún intercambio de población entre los distintos clusters.

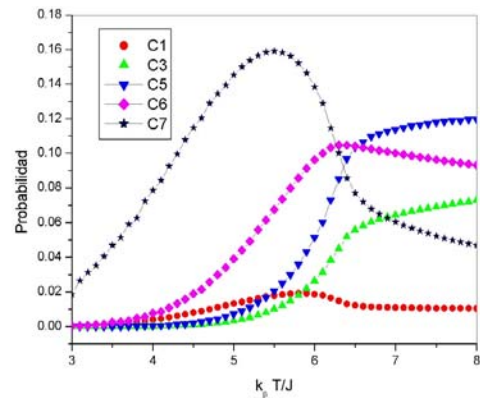


Figura 2. Variación con la temperatura de las PF de los clusters C1, C3, C5 – C7 en la aleación con $c_B = 0.5$.

El conocimiento de las PF de diferentes tipos de clusters en una aleación de composición definida y a una temperatura dada puede ayudar a una mejor comprensión de las primeras etapas de las transiciones de fases, así como elegir los parámetros más óptimos del tratamiento térmico.

Los resultados obtenidos relacionados con el comportamiento de las PF de diferentes clusters como función de la temperatura evidencian la existencia del polimorfismo térmico, es decir, a medida que varía la temperatura de la aleación el predominio de un determinado tipo de cluster es reemplazado por otro tipo de cluster. Análogamente, con la variación de la concentración de la aleación ocurre el intercambio de los clusters predominantes, produciéndose el polimorfismo composicional. Este efecto del polimorfismo térmico y composicional de los clusters, conjuntamente con las propiedades intrínsecas de los clusters podría ser la causa de la dependencia peculiar de las propiedades de las soluciones metálicas homogéneas con la temperatura y concentración [8].

Conociendo las propiedades concretas $f_k(n,m)$ de los diferentes clusters, calculadas, por ejemplo con Dinámica Molecular, mediante la Ecuación 5 se puede predecir la respectiva propiedad de la aleación. Este tipo de predicción será reportado en un trabajo futuro.

* Aparición de pequeños mínimos y máximos

4 CONCLUSIONES

En este trabajo, usando un modelo simple ABV de la aleación binaria mediante la simulación MC se estudió el comportamiento de las PF de diferentes tipos de clusters tanto en función de la temperatura como de la concentración.

El comportamiento peculiar de las propiedades de las soluciones sólidas en función de la concentración y temperatura [8] puede interpretarse como una consecuencia del polimorfismo composicional y térmico de la formación de diferentes clusters atómicos en las aleaciones.

El conocimiento de las PF en una aleación concreta puede ser útil para comprender los mecanismos de las transiciones de fases, así como para los tecnólogos en tratamientos térmicos.

5 REFERENCIAS

- [1] Christian JW. The theory of transformations in metals and alloys. Pergamon Press. 1975.
- [2] Clapp PC. Phys. Rev. B. 1971; 4(2): 255-270.
- [3] Schmauder P. Binkele. Computational Materials Science. 2002; 24(1-2): 42-53.
- [4] Yadram K, Binder K. Int. J. Mod. Phys. C. 1993; 4: 701.
- [5] Vives E, Planes A. International J. of Modern Phys. 1992; 4(3): 701-720..
- [6] N. Metropolis N, Rosenbluth A, Rosenbluth M, Teller A. J. Chem. Phys. 1953; 34(3): 1087-1092.
- [7] Bogdanovich M, Men A. Zhurnal Fis. Jim. 1980; 54(11): 2973-2978.
- [8] Rojas J. Tesis de PhD, Universidad Estatal de Jarkov, Ucrania 1985.