

Dinámica Molecular: Una breve investigación de la transición elástico – plástico en Tántalo

Autor: Oscar Guerrero Miramontes
México – UACJ – 2011 (gumo_99@hotmail.com)

Resumen:

La dinámica molecular es una técnica computacional donde se modela las interacciones de los átomos bajos la influencia de un campo de fuerza que es obtenido de un potencial (función escalar) que depende por lo general de las posiciones de los átomos. Por medio de la dinámica molecular es posible estudiar las transiciones elástico-plástico en materiales bajo compresiones extremas y en donde la velocidad de deformación es del orden de pico a nano segundos!. Los avances recientes en técnicas experimentales de alta presión, especialmente en las áreas de diamond anvil cell (DAC), Laser shock compresión, difracción de rayos X y espectroscopia de fotoelectrones, han aumentado dramáticamente el estudio de las transiciones de fase mediante presión inducida en la última década tanto en los campos teóricos y experimentales.

Usando el bien conocido potencial Embedded atom method (EAM) para modelar las interacciones atómicas, se estudio la transición elástico-plástica en cristales BCC perfectos, especialmente en Tántalo (Ta). Parte de los resultados demuestran la transición elastico-plastico a velocidades deformación de 10^{10} 1/s no se adecua a los actuales modelos plásticos. En estos modelos, la plasticidad ocurre de manera homogénea (difusa) por medio de un proceso de deslizamiento de los átomos que se genera a partir de un cierto valor de tensión (esfuerzo cortante máximo). Se simularon pruebas de deformación vs alargamiento donde la tensión fue aplicada en forma uni-axial en las direcciones [100], [110] e [111]. Los resultados demuestran que la nucleación de defectos en BCC Tántalo en la dirección de compresión [110] se debe a una transformación Martensita-macla (Crystal twinning).

Transición elástico-plástico: Fallo de los modelos de nucleación

Quizás la prueba más importante de la respuesta mecánica de un material es el ensayo de tracción, en donde un extremo de una muestra de barra o alambre es sujeta a un marco y el otro sujeto extremo es sujeto a una carga.

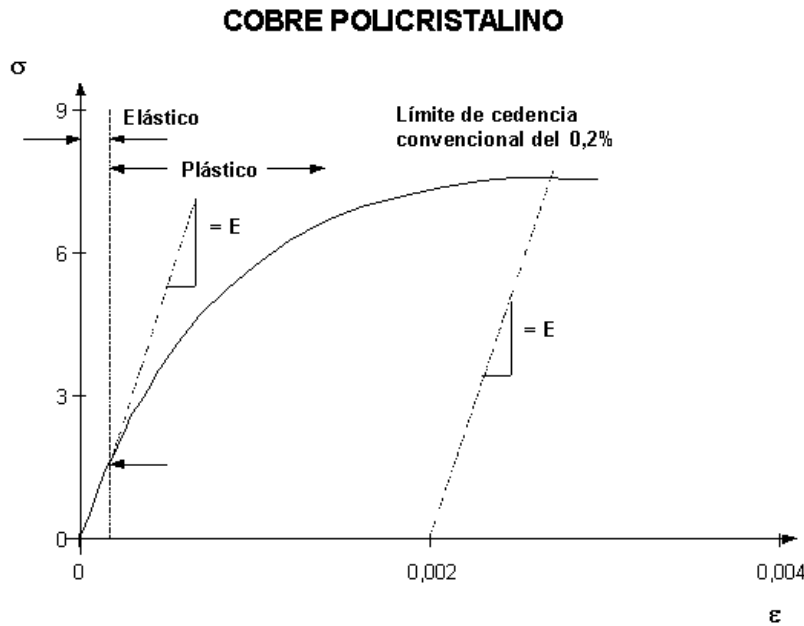


Figura 1. Ejemplificación de la curva esfuerzo vs alargamiento para un material bajo una prueba de tracción. Mientras la tensión aumenta el material se deforma generando dislocaciones (zona plástica). La figura fue obtenida del sitio [\[1\]](#)

Las propiedades de plasticidad son muy variadas y dependen del material, la temperatura, las condiciones de carga, etc. En el nivel atómico la plasticidad es el reordenamiento de los átomos de su configuración actual. Si consideramos un cristal a modo de ejemplo, este puede ser deformado plásticamente deslizando capas completas de los átomos entre sí. Para este desplazamiento pueda suceder, los enlaces entre los átomos tiene que ser estirados elásticamente hasta que puedan cambiar al átomo siguiente. La tensión requerida para este proceso se puede estimar. Varios modelos aproximadamente en los años 30 se propusieron para estimar en cristales perfectos la tensión máxima soportada antes de inducir plasticidad.

- Frenkel (1926): Un valor crítico de esfuerzo de corte es necesario para mover el plano de átomos de una capa sobre otra
- Taylor (1934): Critical resolved shear stress (CRSS) u tensión de orden crítica (español) es el mismo para todo el sistema de deslizamiento en un cristal dado
- Bishop and Hill (1951): Cantidad de trabajo plástico por unidad de volumen es un máximo

Cuando se llevaron acabo experimentos para probar los modelos teóricos propuestos en los anos 30', se descubrió los ensayos de tracción demostraron valores de tensión muy por debajo de los propuestos en la teoría. Esto se debe a que la mayoría de los cristales u materiales en la vida real contiene defectos. Aun, aunque los defectos fueran reducidos mediante un tratamiento térmico, el límite teórico nunca fue alcanzado.

Las descripciones anteriores y en general todos los modelos estructurales en ingeniería civil y en ciencia de los materiales, utilizan la tensión (fuerza / área) como la principal medida de la deformación plástica y la resistencia mecánica de un material [2], es decir, la nucleación defectos en un material ocurre cuando el esfuerzo de corte resuelto alcanza un valor crítico. Por otra parte, simulaciones de compresión de choque usando dinámica molecular en FCC Cobre (100) [Holian y Lomdahl, vol Nature 80, 2085 (1988); Bringa et al, J. Appl. Phys.. vol 96, 3793 (2004)] han estado en desacuerdo con esta descripción. Esas simulaciones muestran que el límite elástico se produce a una tensión de corte inferior al máximo de la dirección especificada y en un porcentaje de deformación más alto que aquel donde se produce este valor de tensión crítica.

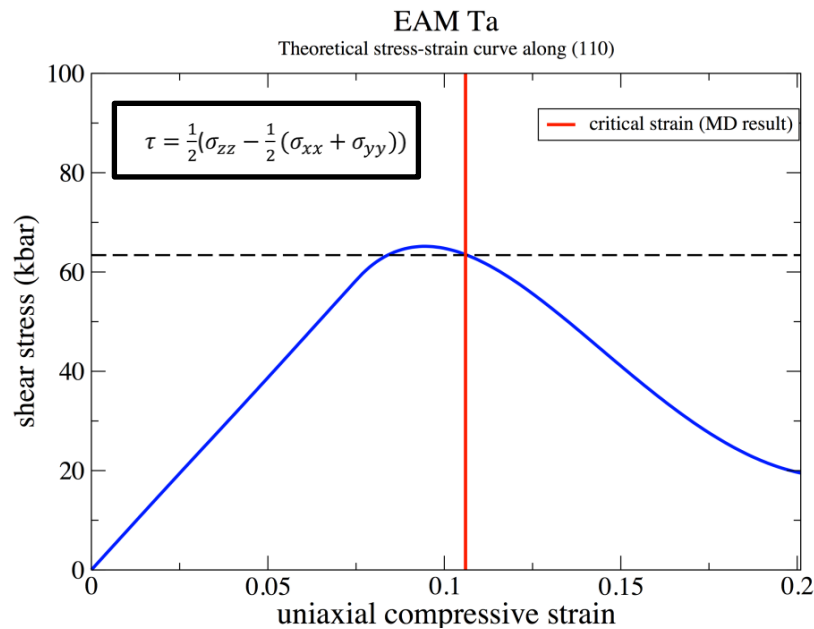


Figura 2. Curva Teorica del esfuerzo cortante (shear stress τ) vs el porcentaje deformación a 0 K en la dirección [110]. La línea color rojo indica donde ocurre la transición elastico-plastico usando simulaciones de dinámica molecular. La línea color negro punteada indica el valor máximo de esfuerzo cortante. Observe que el porcentaje de deformación donde ocurre la transición plástica es mas alto que aquel donde se produce este valor de esfuerzo cortante critico.

Estabilidad Mecánica

La estabilidad mecánica se refiere a la mayor tensión del material puede soportar sin ceder plásticamente (límite de la fuerza teórica). Las Constantes elásticas proporcionar información sobre la resistencia de un material y, a menudo actúan como criterios de estabilidad para estudiar las transiciones estructurales. La inestabilidad de un sistema está determinada esencialmente por la segunda ley de la termodinámica: U (La energía) debe de ser un mínimo en el conjunto microcanónico o canónico para la estabilidad. El criterio Born [3] Supone que la fractura se produce cuando los módulos de elasticidad o corte de una muestra de resistencia se desvanecen en el momento en que la energía de deformación alcanza un valor límite.

$$C_{ijkl} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{kl}} \right) \longrightarrow \text{Det}[C] > 0 \quad (1)$$

La estabilidad mecánica se obtiene cuando el determinante de la matriz de coeficientes elásticos es mayor a cero en función de la deformación

El análisis de la respuesta estructural inestable de una red deforme (un sistema bajo tensión) requiere el uso de las constantes de tensión-deformación [4], que son la generalización de las constantes elásticas (Born no toma en cuenta la contribución de la tensión externa)

$$B_{ijkl} = C_{ijkl} + \frac{1}{2} (\sigma_{il}^0 \delta_{jk} + \sigma_{jl}^0 \delta_{ik} + \sigma_{ik}^0 \delta_{jl} + \sigma_{jk}^0 \delta_{il} - 2\sigma_{ij}^0 \delta_{kl}) \quad (2)$$

Ejemplo : Compresión hidrostática para simétrica cubica $\sigma_{ij}^0 = -p\delta_{ij}$

$$(C_{11} + 2C_{12}) - P > 0 \longrightarrow \text{Det}[B] > 0$$

$$(C_{11} - C_{12}) - 2P > 0$$

$$C_{44} - P > 0$$

Las constantes elásticas y las constantes de tensión-deformación pueden ser calculadas usando dinámica molecular u primeros principios. En nuestro estudio este criterio es de suma importancia al proporcionar un límite teórico del grado de deformación un cristal puede soportar antes de colapsar. El mismo criterio es utilizado para la evaluación de transiciones sólido a líquido. Un

solido y un liquido se distinguen por el modulo de corte. Evaluando las constantes elásticas en función de la temperatura, el cambio de fase de solido a liquido debe de suceder cuando el modulo de corte es igual cero. Recordamos un liquido no posee modulo de corte!.

En este estudio, todas las deformaciones plásticas se encuentran dentro del rango de la estabilidad mecánica que fue calculada usando, el criterio de que la energía en función de la deformación debe ser un mínimo. Recordando principios básicos de calculo, el mínimo de una función puede encontrarse usando el criterio de la segunda derivada , ver ecuaciones (1) e (2).

Simulaciones dinámica molecular

Se generaron para este trabajo 3 diferentes potenciales EAM que fueron nombrados Ta1, Ta2, e Ta3. Todos los potenciales reproducen la misma ecuación de estado, pero el coeficiente elástico C44 fue modificado con el propósito crear un pseudo Tántalo. Las imágenes en este escrito esta limitadas al potencial Ta1, Aunque el uso de otro potencial, daría por resultado que el limite –elastic plastico ocurriera en otro porcentaje de deformación, El mismo mecanismo de nucleación es observado en todos los potenciales.

Tabla 1: Constantes elásticas a 300K, modulo de compresibilidad , constante de la red y energía de cohesividad de los diferentes potenciales (EAM) creados para modelar la interacciones en BCC Tántalo. Las unidades son eV/A³, aproximadamente 1 eV/A³ = 160.2 GPa

Potential	C11 (eV/A ³)	C12 (eV/A ³)	C44 (eV/A ³)	Bo (eV/A ³)	Lattice a (Å)	Ecoh (eV)
Ta1	1.668	0.994	0.550	1.218	3.304	8.1
Ta2	1.638	1.003	0.511	1.213	3.304	8.1
Ta3	1.3535	1.145	0.197	1.215	3.304	8.1
Expeimental	1.640	0.970	0.520	1.193	3.304	8.1

Las simulaciones fueron realizadas usando el programa LAMMPS [5], se genero un SCRIPT y se usaron como se menciono anteriormente, 3

interacciones EAM. La manera como se realizo las simulaciones se muestra a continuación:

- 1) Se realizo un paso del equilibrio que permite la celda computacional se expanda hasta llegar a una temperatura de 300 K, con una presión de cero kbar en cada límite de la caja computacional.
- 2) Luego, la celda de simulación se deforma en la dirección x una velocidad de deformación de 10^{10} 1/s, mientras que los límites transversales a la deformación (y e z) se controlan usando las ecuaciones de movimiento NVT / sllod [6] ecuaciones de movimiento, de esta forma se logro mantener la longitud transversal ade la caja de cómputo constante.
- 3) Los valores de la presión, la temperatura y volumen son almacenados en un archivo separado, que puede ser importado a una aplicación gráfica para el trazado de las graficas. Los archivos de volcado donde se muestra la plasticidad están formato cfg que incluyen la coordenadas, los valores de centrosymmetry, las energías potenciales, y las fuerzas de cada átomo. Esto se puede visualizar directamente con AtomEye. Asumimos un paso de tiempo es igual a 1 fs (10^{-15} s).

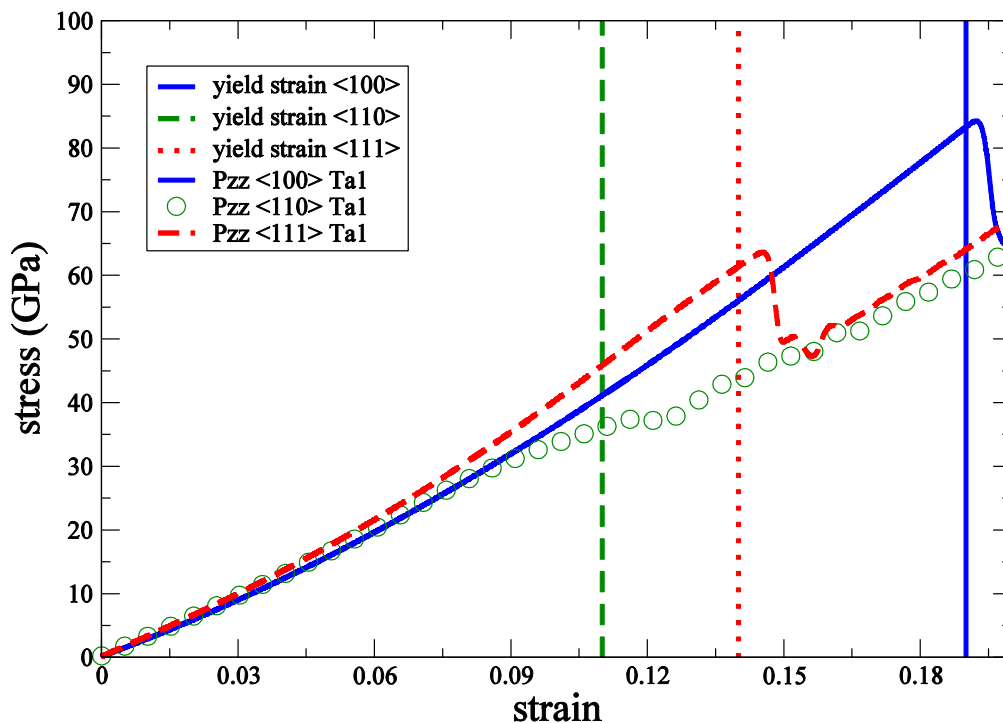


Figura 3. Curva de tensión vs compresión uniaxial a 300K , que fue obtenida usando Dinamica molecular donde el material Tantalum fue comprimido en las direcciones [100]. [110]. [111]. Es evidente la transición elástico-plástico depende de la dirección de compresión

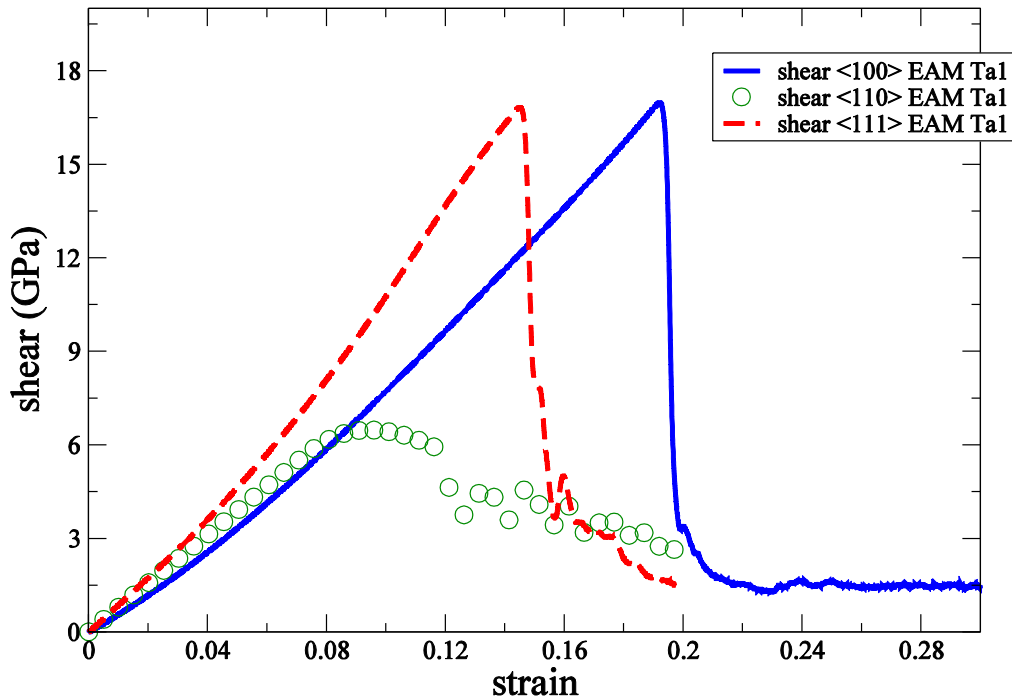
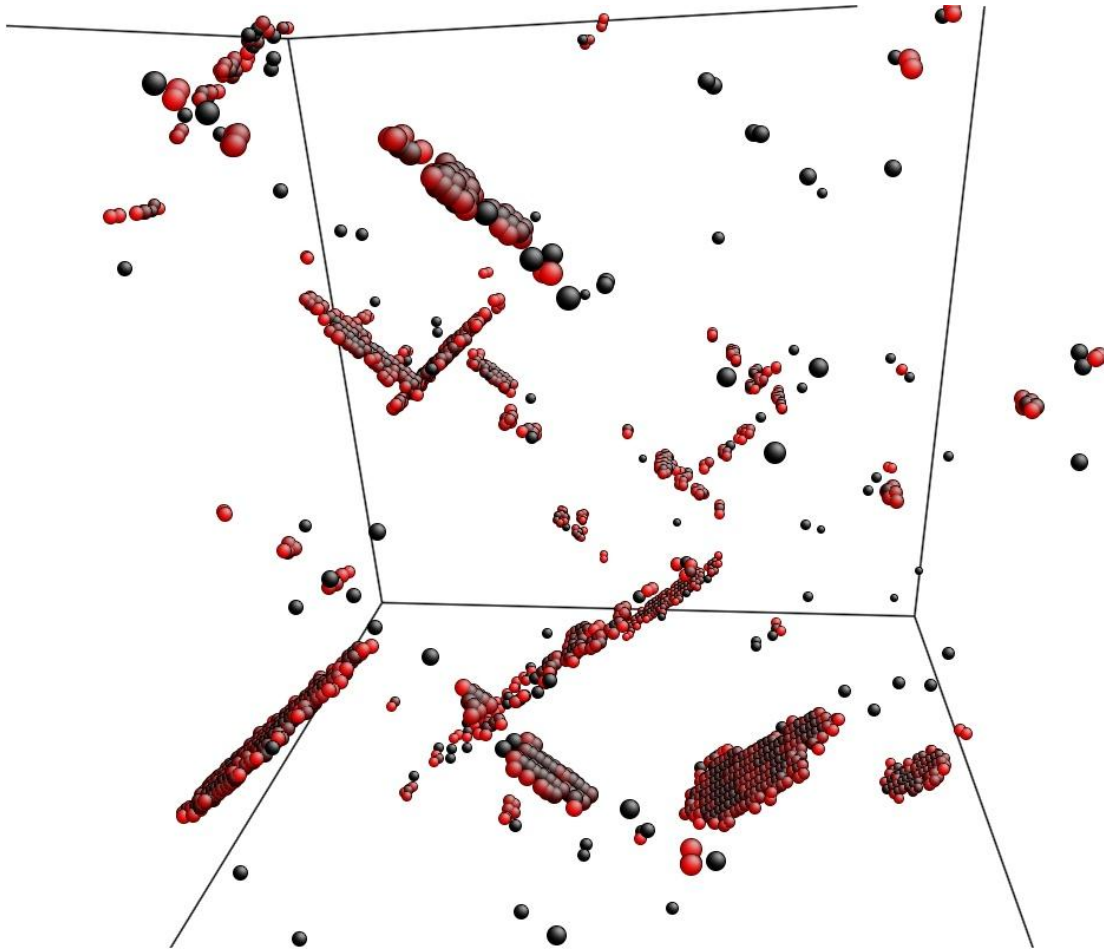


Figura 4. Curva del esfuerzo cortante vs compresión uniaxial a 300 K , que fue obtenida usando Dinamica molecular donde el material Tantalio fue comprimido en las direcciones [100]. [110]. [111]. La transición elastic plástico es evidenciada por el decaimiento drástico del esfuerzo cortante!

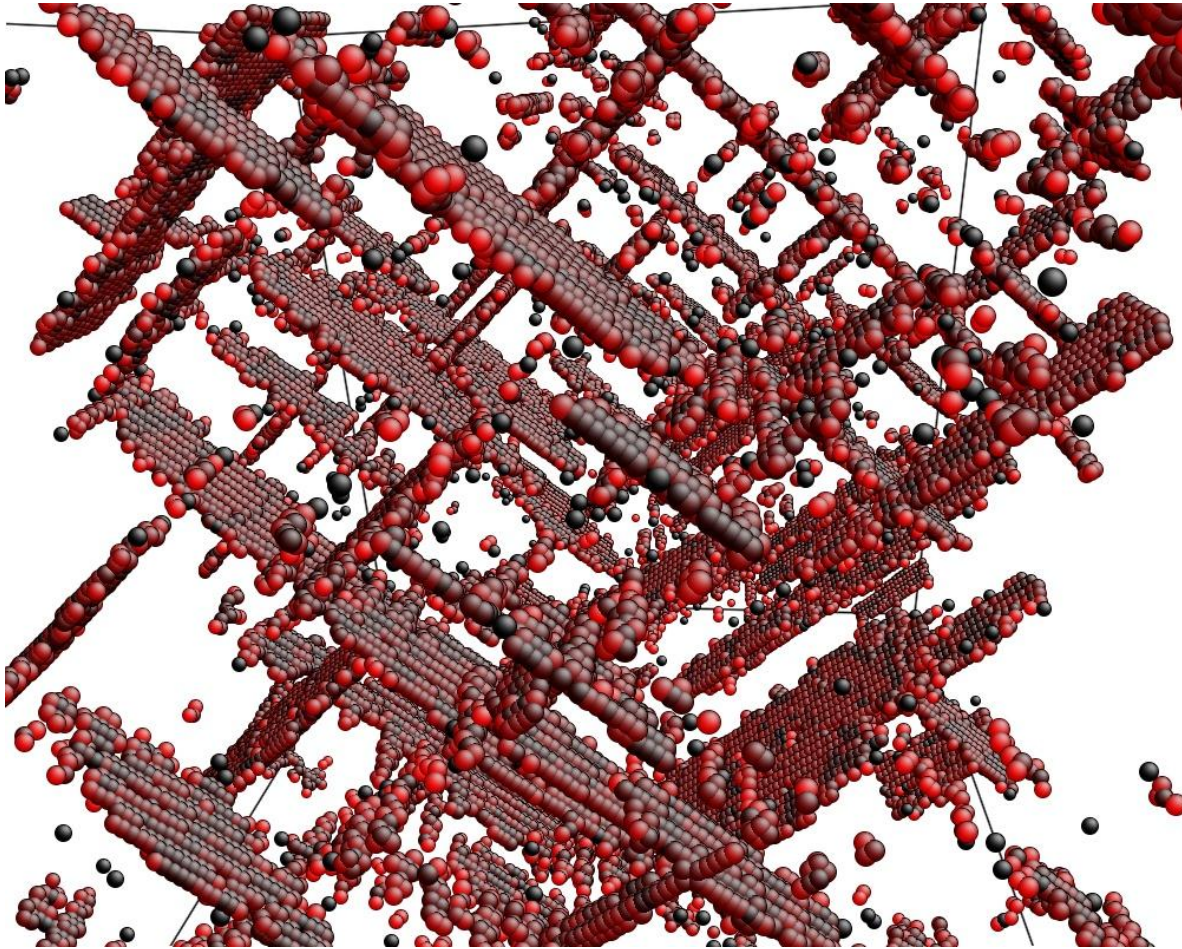
Los resultados en dinámica molecular dan dos resultados importantes, 1) Las transiciones elastico- plasticas ocurren a porcentajes de deformación altísimos! (15% - 20%). Las pruebas de tracción que se realizan en metales policristalinos, por lo general dan valores entre 1% - 3% máximo. 2). El límite de proporcionalidad es en rangos de 40 – 90 GPa

Plasticidad en Tantalio [110] e [100]

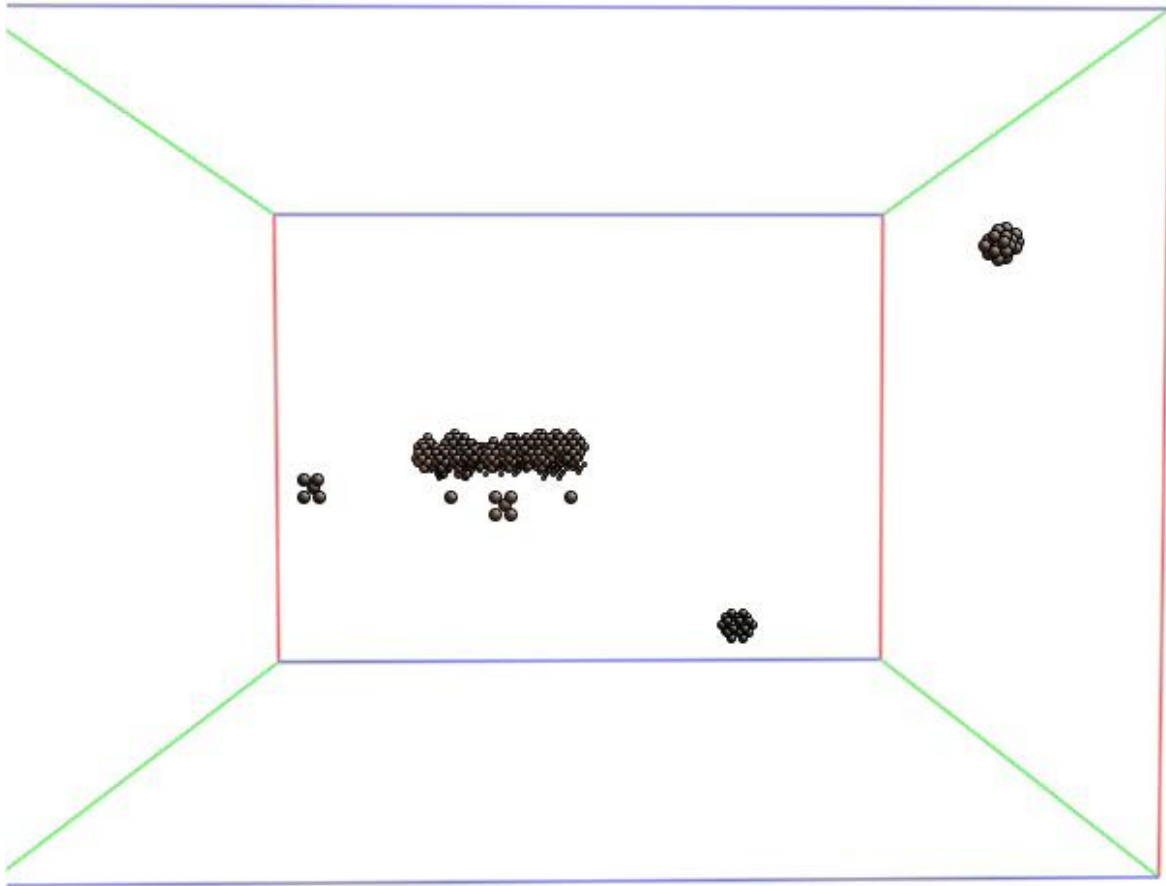
La nucleación de defectos fue visualizada usando el parámetro de centrosymmetry para la compresión en la dirección [110] y en la dirección [100] se usó el vector de desplazamiento, donde la separación de los átomos fue comparada con la configuración inicial de un cristal BCC. La transición elastico plástico fue determinada por 1). Un decremento en la presión , 2). Un incremento repentino en la temperatura y 3). Fluctuaciones en el volumen de la caja computacional



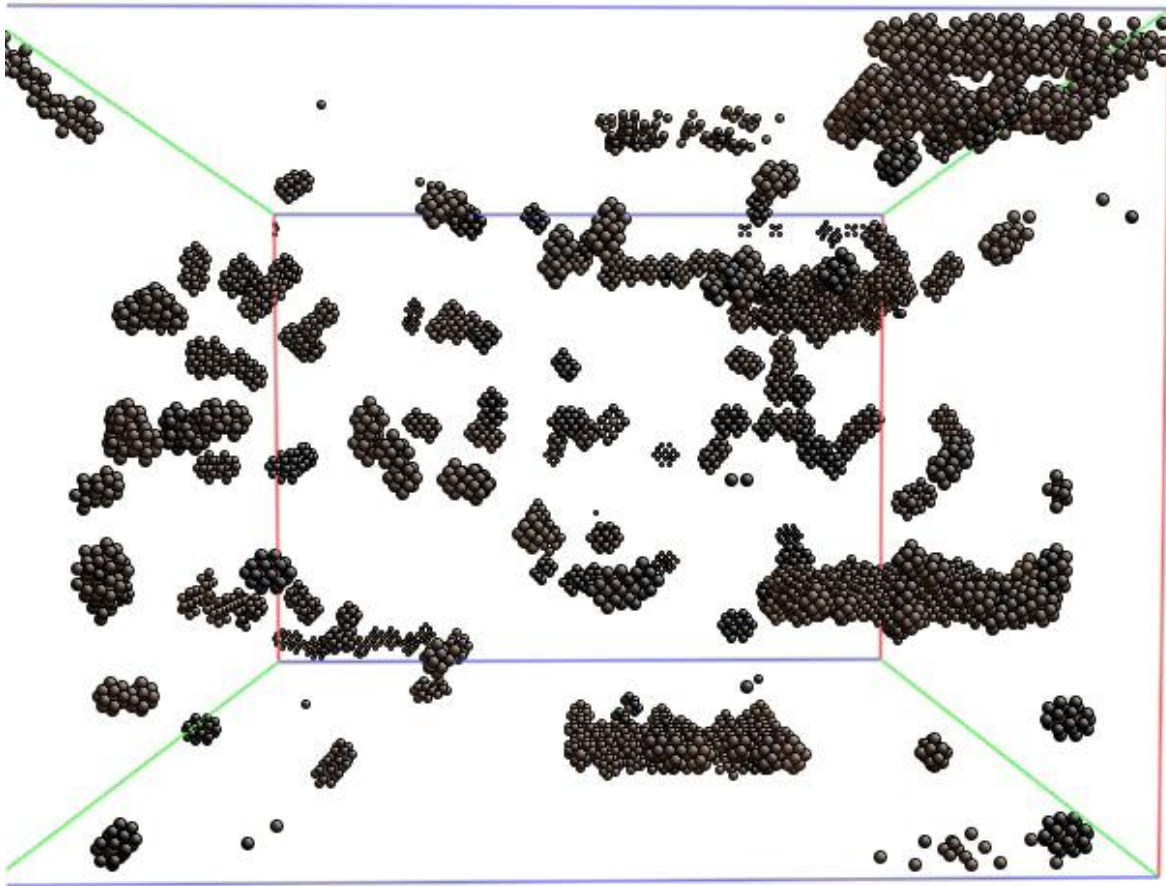
Simulación de 18 millones de átomos para el estudio de la transición elástico plástico en la dirección de compresión $[110]$ a 300K a un porcentaje de deformación del 11% los átomos están graficados acorde al parámetro de centrosimetría. Esta imagen muestra el inicio de la nucleación del defecto



Simulación de 18 millones de átomos para el estudio de la transición elástico plástico en la dirección de compresión $[110]$ a 300K a un porcentaje de deformación del 11% los átomos están graficados acorde al parámetro de centrosimetría. Esta imagen muestra la etapa final de la nucleación del defecto



Simulación de 16 millones de átomos para el estudio de la transición elástico plástico en la dirección de compresión $[100]$ a 300K a un porcentaje deformación del 19% los átomos están graficados acorde al parámetro del vector desplazamiento, donde la separación de los átomos fue compara con la configuración inicial de un cristal BCC. Esta imagen muestra la etapa inicial de la nucleación del defecto



Simulación de 16 millones de átomos para el estudio de la transición elástico plástico en la dirección de compresión $[100]$ a 300K a un porcentaje de deformación del 19% los átomos están graficados acorde al parámetro del vector desplazamiento, donde la separación de los átomos fue comparada con la configuración inicial de un cristal BCC. Esta imagen muestra la etapa final de la nucleación del defecto

Conclusiones

Simulaciones de millones de átomos fueron realizadas para estudiar el límite elástico plástico en materiales BCC. Aunque no todos los resultados importantes fueron mostrados en este escrito, por que esos aun están en proceso de desarrollo. En una opinión humilde del Autor, se ha observado que los actuales modelos usados en la ciencia de los materiales no son útiles para predecir la plasticidad a tiempos escala de la dinámica molecular (1 fs). Lo que implica que los libros actuales en la ciencia de materiales, deberán de ser editados y modificados para incluir estas investigaciones. Experimentos recientemente donde materiales son sometidos a ondas de choque que comprimen materiales

quasi-isentropicamente en el orden de nano a pico segundos son ahora realizables! . Simulaciones por medios de las ecuaciones del hugonio (hugoniot curve), se están realizando actualmente para entender los compartimientos plásticos a estas escalas de tiempo, parte de los modelos propuestos actuales provén que un gran factor en la explicación de la predicción plástica se deberá a la contribución e las vibraciones atómicas de los átomos (Densidad que estados) que a estas a escalas de tiempo contribuyen a la creación defectos (phonon-softening). Se observo la transición elástica en tantalum en la dirección de compresión un-axial [110] es debido a una transición Macla (crystal twinning). Parte de estas investigaciones han encontrado la resistencia de los materiales perfectos puede modificarse y ser ultra – resistentes y pasar los límites teóricos propuestos en los años 30'

REFERENCIAS

- [1] <http://descom.jmc.utfsm.cl/sgeywitz/tecnologia/ensayos.htm>
- [2] J. A. Zimmerman, H. Gao, and F. F. Abraham, [Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 8, 103 \(2000\).](#)
- [3] S. D. Shafrai and T. N. Hatsevich, [Volume 40, Number 6, 1148-1154](#)
- [4] Jinghan Wang and Sidney Yip [Phys. Rev. Lett. 71, 4182–4185 \(1993\)](#)
- [5] Lammmps <http://lammmps.sandia.gov/>
- [6] S.Hose [J. Chem. Phys. 81](#), 511 (1984); doi:10.1063/1.447334
- [7] Mark A. Meyers, Lawrence E. Murr, [Shock Waves and High-Strain-Rate Phenomena in Metals, Plenum Press](#), New York (1981), pp. 675-702.