

Capítulo 7

Modelado para materiales con estructura BCC

Como se ha explicado anteriormente, en el programa se aplica una deformación a un material con estructura cúbica con un nanohuevo en su interior. La red cristalina que está implementada en el programa es la cúbica centrada en las caras (fcc), y los potenciales preparados para ser usados son el Lennard-Jones y el Embedded-atom method (EAM).

Uno de los objetivos de este proyecto es la implementación de una nueva estructura atómica, correspondiente a materiales con red cúbica centrada en el cuerpo (bcc). Para predecir las propiedades de estos materiales, no es suficiente considerar la interacción solo con los átomos más cercanos, sino que es necesario considerar en el modelo de vecinos los que se encuentren hasta una distancia igual al parámetro de red (“segundos vecinos”). En este sentido, hay que incorporar un nuevo potencial, llamado Finnis-Sinclair, que recoja este hecho y, por lo tanto, sea adecuado para el estudio de materiales con esta nueva red.

Aunque la mayor parte del programa tiene en consideración el tipo de estructura cristalina del material (bcc o fcc), se ha tenido que modificar, entre otras partes, la función destinada a calcular la posición relativa de los vecinos de un átomo. La nueva función implementada y el potencial Finnis-Sinclair se describen a continuación.

7.1. Estructura cúbica centrada en el cuerpo

En distintas partes del programa es necesario calcular las coordenadas globales de los átomos que están situados alrededor del que estamos considerando. Por esto, es necesario que haya una función destinada a devolver la lista de posiciones relativas de estos átomos respecto a un átomo central. Dicha función está implementada de tal forma que si durante el programa se

llama a la función para que proporcione el vecino “n”, ésta devuelve las localizaciones relativas de los átomos cuya distancia sea la “n” más cercana a un átomo de referencia.

La función se podría dividir en dos etapas: en la primera se aumenta la distancia hasta encontrar las localizaciones de los átomos cuyas coordenadas (se utilizan coordenadas de red, es decir números enteros) sean todas positivas; en la segunda parte encuentra por simetría el resto de las localizaciones que están a la misma distancia. Así, sucesivamente va encontrando los átomos situados a distancias mayores. Por ejemplo, en la primera búsqueda encuentra la posición (1 1 1) y por simetría se obtienen el resto de los primeros vecinos ((1 1 -1), (1 -1 1), (-1 1 1), (-1 -1 1)...), las siguientes coordenadas que encuentra son los segundos vecinos (2 0 0), (0 2 0), (0 0 2) y sus simétricos; y así se obtienen los vecinos que se deseen.

A continuación podemos observar la primera parte, que es la que se ha modificado:

```
static int fill octant(int shell number)
{
    vec++;

    do {

        int l max;
        int l1;
        int l2;
        int l3;

        l max=floor(sqrt(p));

        /* loop over all integers inside [0,l max]x[0,l max]x[0,l max] */

        for (l1=0; l1 <= l max; l1++)
            for (l2=0; l2 <= l max; l2++)
                for (l3=0; l3 <= l max; l3++)

                    if (((l1*l1+l2*l2+l3*l3 == p) && (p%4 == 0)) ||
((l1*l1+l2*l2+l3*l3 == p) && ((vec-1)%3 == 0) && ((p+1)%4 == 0))) {

                        if (add new site(shells[shell number-1], l1, l2, l3) ==
RETURN ERR)

                            return(RETURN ERR);

                    }

                p++;
```

```

} while(shells[shell number-1]->number sites == 0);

/* number shells++; */

return(RETURN OK);
}

```

7.2. Potencial tipo Finnis-Sinclair

La energía potencial basada en el potencial de Finnis-Sinclair tiene la siguiente forma:

$$E_{tot} = E_N + E_P = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (7.1)$$

con:

$$\rho_{h,i} = \sum_{j(\neq i)} f_j(R_{ij}) \quad (7.2)$$

$$F_i(\rho_i) = -A\sqrt{\rho_i} \quad (7.3)$$

Hay varias interpretaciones físicas del modelo, una de ellas supone que E_N representa la energía cohesiva de “grupo”, característica de los metales y E_P es una energía repulsiva resultante de la interacción entre átomos. Otra interpretación posible es similar al EAM, es decir, supone que ρ_i es la densidad electrónica de carga en el sitio i construida como la superposición de las densidades de carga del resto de los átomos (f) y la energía $F_i(\rho_i)$ la que supone colocar el átomo i en un gas de densidad electrónica uniforme ρ_i . Por último, también se podría considerar que E_N es la parte de la energía dependiente del volumen (ρ_i sería una medida de la densidad local de un sitio atómico) y E_P la energía procedente de la interacción de átomos de forma individual.

El resto de parámetros se ajustan para que la energía de cohesión, el volumen en equilibrio y los tres módulos elásticos para un metal de transición cúbico centrado en el cuerpo sean los correctos:

$$\begin{aligned} f(r) &= (r-d)^2 & \text{para } r \leq d \\ \phi(r) &= (r-c)^2 (c_0 + c_1 r + c_2 r^2) & \text{para } r \leq c \end{aligned} \quad (7.4)$$

donde c y d son parámetros situados entre el segundo y tercer vecino, y c_0 , c_1 y c_2 parámetros libres (tabulados en tablas) para ajustar con datos experimentales. Dichos parámetros se ajustan para que el potencial recoja las interacciones entre átomos que se encuentren a una distancia real, por esto hay que definir el potencial a trozos para recoger la alta repulsión que existe cuando dos átomos están muy cercanos. El potencial queda como se observa a continuación:

$$\rho_i = \sum_{j(\neq i)} f_j(r) \quad (7.5)$$

$$\begin{aligned} f(r) &= (r-d)^2 \quad \text{para } r_i \leq r \leq d \\ f(r) &= 0 \quad \text{para } r > d \end{aligned} \quad (7.6)$$

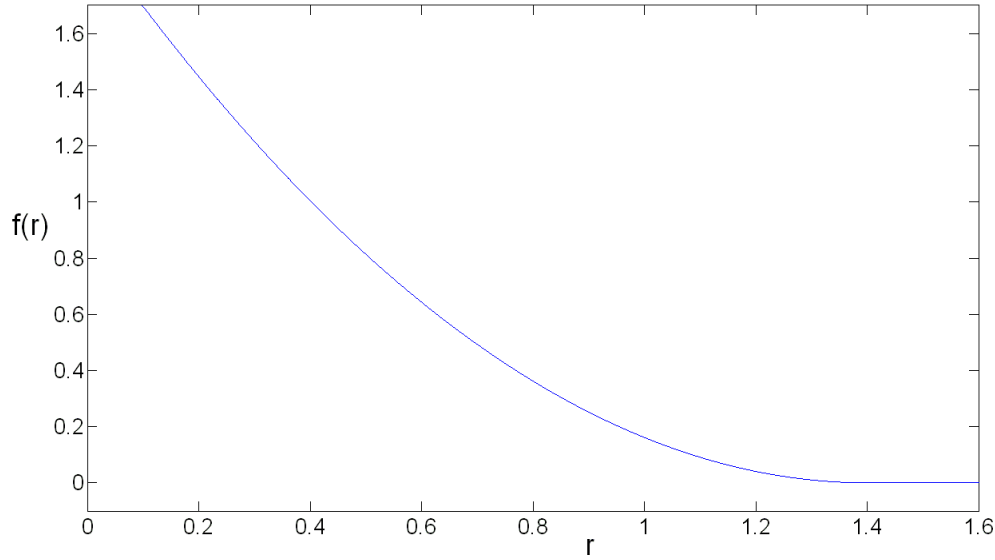


Figura 7.1: Potencial de Finnis-Sinclair-I

$$\begin{aligned} \phi(r) &= a + br + c'r^2 + d'r^3 \quad \text{para } r < r_s \\ \phi(r) &= (r-c)^2 (c_0 + c_1r + c_2r^2) \quad \text{para } r_s \leq r \leq c \\ \phi(r) &= 0 \quad \text{para } r > c \end{aligned} \quad (7.7)$$

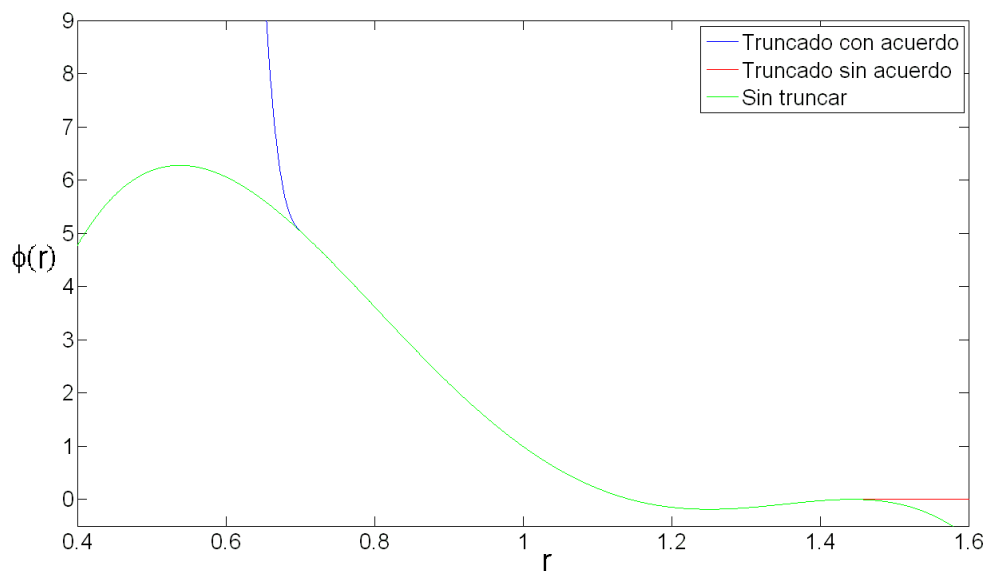


Figura 7.2: Potencial de Finnis-Sinclair-II

siendo a , b , c' y d' parámetros de ajuste que dependen de c , d , c_0 , c_1 y c_2 , r_i y r_s . Su cálculo se puede observar en el anexo II y la implementación del potencial en el programa en el anexo III.