

Apéndice A

Potenciales atómicos

Para modelar las fuerzas interatómicas es necesario la utilización de un potencial empírico para cuantificar la energía del material. Existen diferentes potenciales que podemos utilizar. Sin embargo cada uno, se adecua mejor a ciertos tipos de materiales, debido a que están formulados para modelar diferentes fenómenos físicos. En el programa utilizado, los potenciales empleados, fueron el Potencial de Lennard-Jones, que se utilizó para modelar Ar y el potencial EAM que se utilizó para modelar Cu y Al. Estos potenciales tienen parámetros de ajuste que se obtienen de forma empírica y hacen que posean menos errores cuando simulamos la interacción. Debemos comentar que para la adecuada modelización en el programa es necesario eliminar dichas constantes, de manera tal que evitemos errores de redondeo en las operaciones, es más útil adimensionalizar el problema. De esta manera, los potenciales utilizados, se adimensionalizaron como se muestra a continuación.

A.1 Potencial de Lennard-Jones

El potencial de Lennard-Jones es un modelo matemático sencillo para representar el comportamiento interatómico. Fue propuesto por Jones (1924). La expresión de dicho potencial es

$$\Phi^* = \frac{\Phi(r^*)}{4\epsilon} = \left[\left(\frac{1}{r^*} \right)^{12} - 2 \left(\frac{1}{r^*} \right)^6 \right] \quad (\text{A.1.1})$$

$$\mathbf{F}^* = \frac{\partial \Phi^*(r^*)}{\partial r^*} = 12 \frac{1}{r^*} \left[\left(\frac{1}{r^*} \right)^6 - \left(\frac{1}{r^*} \right)^{12} \right] \quad (\text{A.1.2})$$

siendo r^* la coordenada adimensionalizada igual a $r^* = r/\sigma_0$. Tanto Φ^* como \mathbf{F}^* representan el potencial y la fuerza adimensionalizada y para obtener los valores de las mismas con sus respectivas unidades debemos tener en cuenta la siguiente relación

$$\Phi(r) = 4\epsilon\Phi^* \quad (\text{A.1.3})$$

$$\mathbf{F} = \frac{\sigma_0}{4\epsilon}\mathbf{F}^* \quad (\text{A.1.4})$$

La tensión virial viene dada por la siguiente relación

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{k \in \Omega} (r_{\alpha}^i - r_{\alpha}^j) f_{\beta}^{ij} \quad (\text{A.1.5})$$

donde k son los átomos en el volumen Ω , r_{α}^i es la componente α de la posición del átomo i , y f_{β}^{ij} es la componente β de la fuerza entre el átomo i y el j .

Para obtener la tensión virial a partir de los potenciales adimensionalizados, debemos realizar la siguiente conversión

$$\sigma_{\alpha\beta}^* = \sigma_{\alpha\beta} \frac{\sigma_0^3}{4\epsilon} \quad (\text{A.1.6})$$

donde $\sigma_{\alpha\beta}^*$ es la tensión virial adimensionalizada la cual es calculada a partir del potencial adimensionalizado.

Si consideramos el caso del Ar, las constantes involucradas son las siguientes

$$\sigma_0 = 0,32 \times 10^{-9} m \quad 4\epsilon = 0,0104 eV \quad 1eV = 1,602 \times 10^{-19} Nm \quad (\text{A.1.7})$$

$$\frac{\sigma_0^3}{4\epsilon} = 2,36 \times 10^{-8} \frac{1}{\text{Pa}} \quad (\text{A.1.8})$$

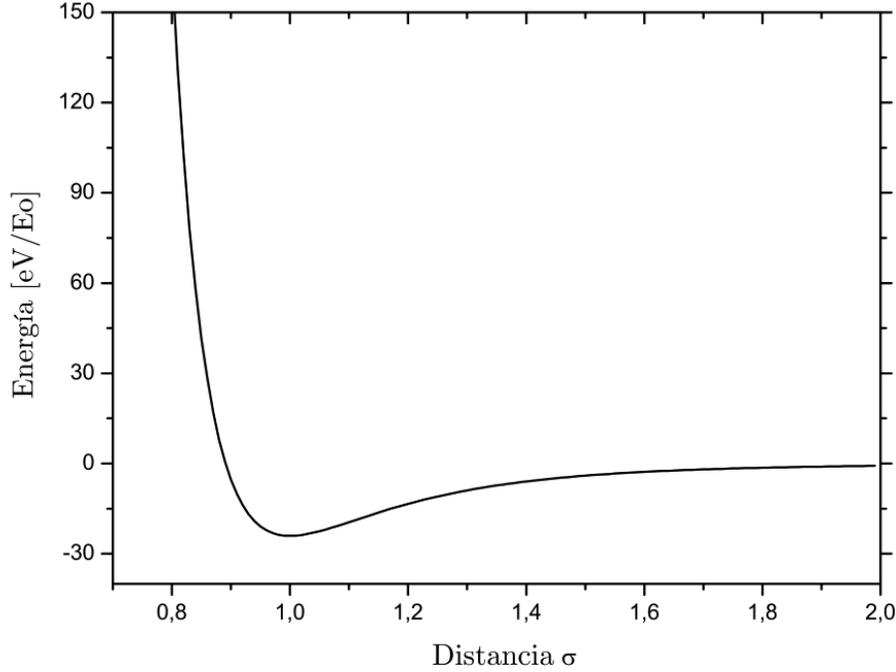


Figura A.1: Potencial Lennard-Jones para argón utilizado en las simulaciones realizadas

A.2 Potencial del Método del Átomo Embebido

El método del átomo embebido es un potencial empírico que sirve para modelar la interacción para los metales de transición del tipo FCC. La energía potencial del cristal se expresa de la siguiente manera

$$V = \sum_{a=1}^N \left[\frac{D}{2} \sum_b \phi(r_{ab}) + F(\rho_a) \right] \quad (\text{A.2.1})$$

donde el primer término se corresponde a la interacción entre pares de átomos y el segundo término representa la cohesión dependiente de la densidad electrónica. Éste término es conocido como función de cohesión. Aquí se utilizaron las formas analíticas de las funciones que se recomiendan para potencial.

$$\phi(r) = \phi_e \exp \left[-\gamma \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right] \quad (\text{A.2.2})$$

$$F(\rho) = -E_c \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} \ln \frac{\rho}{\rho_e} \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\alpha/\beta} - \Phi_e \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\gamma/\beta} \quad (\text{A.2.3})$$

$$\rho_a = \sum_b f(r_{ab}) \quad (\text{A.2.4})$$

$$f(r_{ab}) = f_e \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right] \quad (\text{A.2.5})$$

donde r_e y ρ_e representan la distancia al primer vecino y la densidad electrónica en el equilibrio a 0 K. Los parámetros α , β , γ , Φ_e , E_c y f_e son optimizados para cada material en base a sus propiedades cohesivas. Por ejemplo, para el Cu los valores utilizados son los siguientes

$$a_0 = 0,361nm \quad \alpha = 5,09 \quad \beta = 5,85 \quad \gamma = 8,00 \quad (\text{A.2.6})$$

$$\Phi_e = 0,59eV \quad E_c = 3,54eV \quad (\text{A.2.7})$$

La fuerza que experimenta cada átomo viene dada por la siguiente expresión

$$\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_a} = \sum_b \{ [F'(\rho_a) + F'(\rho_b)] f'(r_{ab} + \phi'(r_{ab})) \} \frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}} \quad (\text{A.2.8})$$

De igual manera que para el potencial Lennard-Jones se ha adimensionalizado el potencial EAM. Si deseamos obtener los valores de energía, fuerza y tensión debemos multiplicar los valores por las constantes anteriormente comentadas, pero con la diferencia que debemos utilizar las correspondientes al material. El potencial EAM-Mishin para cobre y aluminio viene definido por Mishin y col. (2001) y Mishin, Mehl y Papaconstantopoulos (2002) respectivamente.

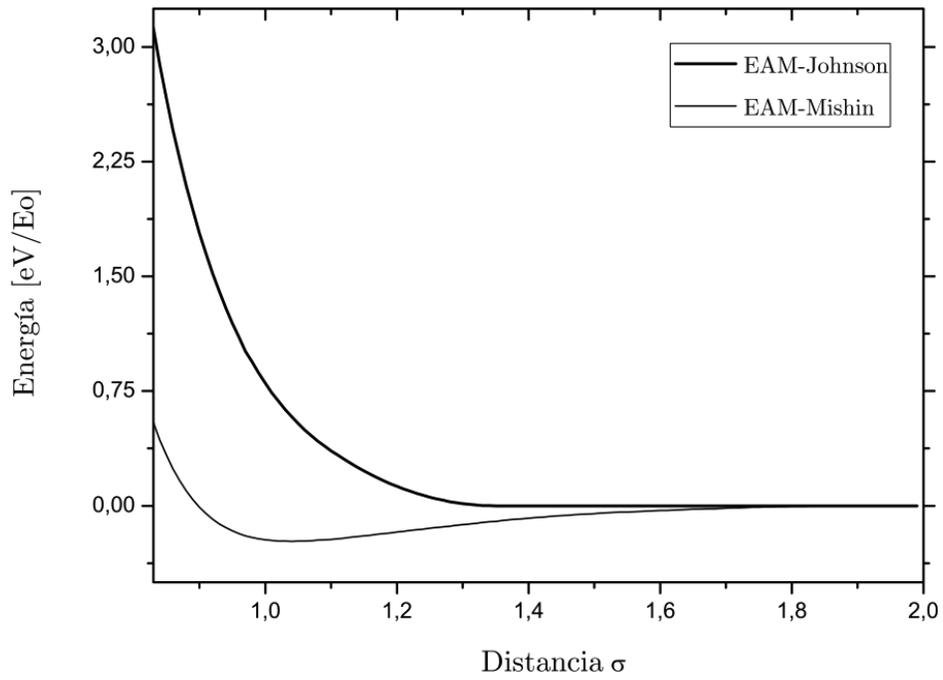


Figura A.2: Potencial EAM-Johnson y EAM-Mihsin para cobre utilizados en las simulaciones realizadas

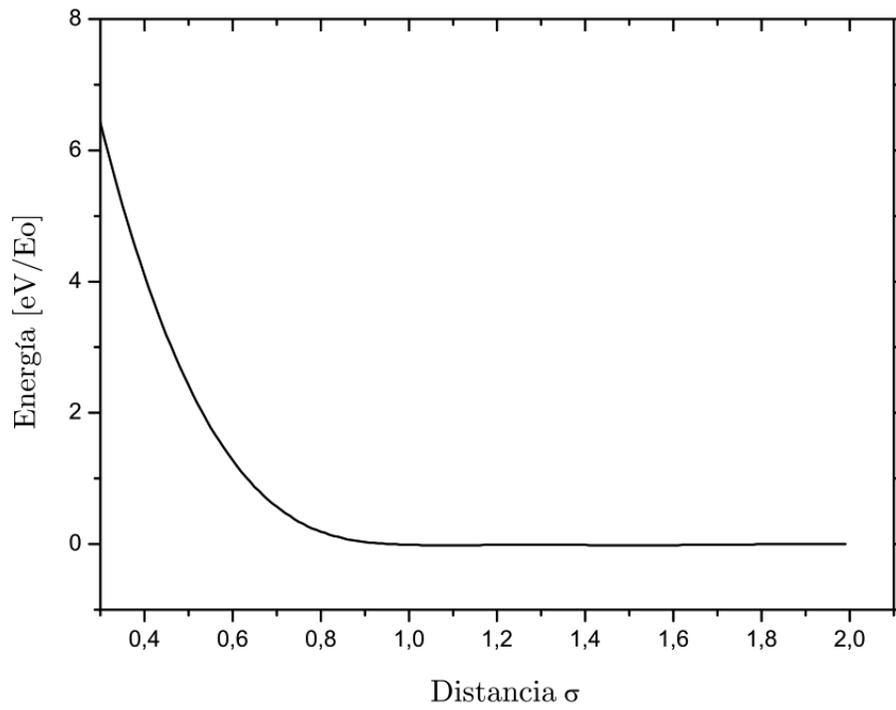


Figura A.3: Potencial EAM-Mishin para aluminio utilizado en las simulaciones realizadas