

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO 1	AÑO 1978

01.78.16

CNEA-NT 7/78

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA  
CENTRO ATOMICO BARILOCHE  
GERENCIA DE DESARROLLO

DEFECTOS POR REDES CRISTALINAS

C.E. Laciana, A.M. Monti, C.N. Tome, E.J. Savino

BUENOS AIRES  
Mayo de 1978

## DEFECTOS EN REDES CRISTALINAS

por

C.E.Laciana<sup>+</sup>, A.M.Monti<sup>+</sup>, C.N.Tomé<sup>++</sup>, E.J.Savino<sup>+++\*</sup>

### RESUMEN:

Se resumen los métodos de función de Green y de simulación por computadora para el cálculo de la estructura de defectos en redes discretas. Se discuten las ventajas y limitaciones de cada método. Se calcula la configuración de vacancias e intersticiales en redes hexagonales compactas, con especial énfasis en la simetría del defecto. Utilizando el método de función de Green se calcula el desplazamiento de los vecinos cercanos a una impureza en un sitio octaedral de la red cúbica centrada en el cuerpo.

### ABSTRACT:

The lattice static Green function method and the computer simulation technique are reviewed for calculating defects induced lattice distortion. Both methods are critically compared. The configuration of vacancies and interstitials in hexagonal close packed metals is calculated with emphasis in the lattice induced defect symmetry. Also the atomic displacements of the near neigh-

four atoms to an octahedral interstitial in a bcc crystal are calculated within the Green function method.

- + Departamento de Materiales, Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina.
- ++ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.
- +++ Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina.
- \* Dirección permanente: Departamento de Materiales, Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina.

### 1) Introducción

Los defectos cristalinos, o sea el apartamiento en la periodicidad de la red en una zona delimitada, determinan gran parte de las propiedades tecnológicamente relevantes de un metal. Clásicamente se han estudiado estos defectos en la aproximación del continuo elástico, considerándolos como una inclusión con coeficientes elásticos diferentes a los de la matriz (1) o como una falla topológica del continuo, v.g. las dislocaciones. Esta aproximación reproduce (2) fundamentalmente el campo de largo alcance pero surge la contradicción que no solo no reproduce el campo en zonas de gran distorsión, núcleo del defecto, sino que además las propiedades de largo alcance están determinadas por la configuración de este núcleo. O sea si bien una vacancia o un intersticial puede aproximarse a largo alcance como una inclusión, las constantes elásticas asociadas a esta inclusión se hallan determinadas por la distorsión en las cercanías del sitio vacante o el átomo extra. Por otro lado, el defecto posee una anisotropía intrínseca determinada esencialmente por la simetría del sitio que ocupa en la red, aún cuando esta simetría puede reducirse por la distorsión asociada. Solo en una aproximación discreta estas características son debidamente consideradas.

El propósito del presente trabajo es presentar una revisión de las técnicas de cálculo de la configuración de defectos en una

red cristalina destacando las ventajas y limitaciones de estas técnicas. Se presentan además ejemplos en redes hexagonales y cúbicas.

2) Técnicas de cálculo de la configuración de defectos cristalinos.

2.1) Función de Green.

Kanzaki (3) en 1957 fué el primero en desarrollar esta técnica para el cálculo de la configuración de vacancias. Recientemente Tewary ha realizado un trabajo de revisión (4). La técnica de cálculo también llamada de estática de la red resulta de realizar idénticas aproximaciones que para cálculos de dinámica de redes, pero en el límite de frecuencia cero. Se supone que al introducir un aglomerado de defectos en la red la energía del conjunto red-aglomerado puede escribirse como (5)

$$\phi = \phi_0 + V + 1/2 \sum_{\underline{l}} \hat{u}(\underline{l}) \phi_{\underline{l}}(\underline{l}, \underline{l}') u(\underline{l}') + 1/2 \sum_{\underline{n}} \hat{u}(\underline{n}) \phi_{\underline{n}}(\underline{n}, \underline{n}') u(\underline{n}') \quad (1)$$

donde  $u$  son los desplazamientos atómicos, siendo  $\underline{l}$  átomos de la red y  $\underline{n}$  defectos,  $\phi_0$  es la energía de la red perfecta y  $V$  aquella acumulada en los vínculos entre la red y el defecto. Las matrices  $\phi_{\underline{l}}$  son las constantes de fuerza que vinculan los desplazamientos entre sí.

Minimizando (1) frente a los desplazamientos se obtienen estos como (5):

$$\underline{u}(\underline{l}) = \underline{G}(\underline{l}, \underline{l}') \underline{F}(\underline{l}') \quad (2 a)$$

$$\underline{u}(\underline{n}) = \underline{G}(\underline{n}, \underline{n}') \underline{F}(\underline{n}') \quad (2 b)$$

donde  $\underline{G}(\underline{l}, \underline{l}') = \underline{\phi}^{-1}(\underline{l}, \underline{l}')$  y

$$\underline{F}(\underline{l}/(\underline{n})) = - \left[ \partial/\partial u_x(\underline{l}/(\underline{n})), \partial/\partial u_y(\underline{l}/(\underline{n})), \partial/\partial u_z(\underline{l}/(\underline{n})) \right] \sum_{\underline{n}/(\underline{l})}^V (|\underline{l}-\underline{n}|)$$

Para un efecto individual o un aglomerado en el cual la interacción directa entre defectos puede suponerse nula la matriz  $\underline{G}(\underline{n}, \underline{n}')$  es singular y la ecuación (2b) se reduce a

$$\underline{F}(\underline{n}) = 0 \quad \forall \quad \underline{n} \quad (3)$$

La matriz  $\underline{G}(\underline{l}, \underline{l}')$  coincide con la función de Green de la red perfecta. En la aproximación arriba desarrollada esta matriz se calcula solo una vez por red a estudiar, pues la simetría del defecto solo varía las fuerzas  $F$ . O sea que el defecto se halla definido por un campo de fuerzas aplicadas sobre un sub-espacio de los átomos de la red que lo contiene. En la aproximación del continuo de considerar las distancias interatómicas mucho más pequeñas que las distancias características (2a) puede desarrollarse en serie de Taylor alrededor del origen, donde se supone ubicado el centro de simetría del defecto, y resulta:

$$u_i(\underline{l}) = G_{ij}(\underline{l}, 0) \sum_{\underline{l}'} F_j(\underline{l}') + G_{ij,s}(\underline{l}, 0) \sum_{\underline{l}'} l'_s F_j(\underline{l}') \quad (4)$$

Utilizando (3) el primer término resulta nulo, se demuestra entonces que en el límite de ondas largas el defecto se halla definido por el tensor

$$P_{ij} = \sum_{\ell'} F_{\ell}(\ell') \ell'_j \quad (5)$$

Este tensor depende solo del campo de fuerzas que simulan al defecto y la simetría de la red.

## 2.2) Generación de la función de Green de la red perfecta.

La función de Green necesaria a fin de calcular la distorsión generada por el defecto, ecuaciones (2) y (4), se construye en general a partir del espectro de dispersión fonónica en la red perfecta. Esto implica que en el límite de ondas largas  $-q \rightarrow 0$  en el espacio recíproco debe coincidir con la función de Green elástica dado que la rama acústica del espacio fonónico en el límite  $q \rightarrow 0$  se halle determinada por las constantes elásticas del material. En general en la literatura se ajusta el espectro de dispersión por una matriz de constantes de fuerza deducida empírica o teóricamente y la función de Green puede obtenerse a través de una inversión sobre un número finito de puntos de la primera zona de Brillouin del material (4,6). Esta también puede obtenerse en forma directa de la curva de dispersión en la forma propuesta por Bullough y Tewary (7). Por otro lado Schober et al. (8) criticaron estas aproximaciones en el sentido que al efectuarse una suma sobre un discreto

de puntos en el espacio recíproco la convergencia al límite elástico no es alcanzada. En un artículo anterior (9) hemos sin embargo probado que esta crítica no es válida para la función de Green reducida en el subespacio de defectos de alta simetría. Una aproximación iterativa a las anteriores que presenta además la ventaja de la sencillez de cálculo es la semidiscreta. Esta se presenta en el próximo párrafo y se basa en un conocimiento de la función de Green elástica del material.

Si se supone la validez de la función de Green elástica para átomos ubicados más allá de una cierta distancia  $R$  del origen  $Q$  de aplicación a una fuerza de la red, o sea en una región que llamaremos II donde  $|\underline{p}-Q| > R$  el desplazamiento de los átomos ubicados en ella resulta

$$\underline{u}^{\text{II}}(\underline{p}) = \underline{G}^{\text{el}}(\underline{p}, Q) \underline{F}(Q)$$

La función de Green de aquellos átomos que se hallan a una distancia inferior a  $R$  puede calcularse suponiendo conocida la matriz de constante de fuerzas (nula fuera de una cierta distancia  $R'$  de interacción). Si se aplica una fuerza unitaria en el origen en la dirección  $j$  los átomos de la región I ( $|\underline{p}-Q| \leq R$ ) se desplazan, dentro de la aproximación armónica, en

$$u_i^j(\underline{p}) = [\phi_{rr}^{-1}]_{ij}(\underline{p}, Q) - [\phi_{rr}^{-1}]_{ik}(\underline{p}, Q') [\phi_{r\Pi}]_{kh}(\underline{p}', Q'') [G^{\text{el}}]_{hj}(\underline{p}'', Q)$$

( 7 )



Donde los subíndices I y II implican interacción entre los átomos de estas regiones. Por definición

$$G_{ij}^I(\underline{\ell}, \underline{0}) = u_j^I(\underline{\ell})$$

Debido a la suposición de que el alcance de la interacción es finito el cálculo de la expresión (7) implica la inversión de matrices finitas, manejables numéricamente. Esta aproximación para el cálculo de la función de Green semidiscreta es particularmente conveniente para el caso de redes hexagonales donde la función de Green elástica es resoluble analíticamente.

### 2.3) Técnica de simulación por computadora.

Esta técnica se basa, al igual que la anterior, en suponer la red vinculada por un potencial de interacción de un alcance relativamente corto. Se simula una región de la red, donde se ubicará al defecto, a través de las coordenadas atómicas. El defecto se supone que interactúa con la red a través de un potencial también de alcance corto. Esta región del cristal -llamada en general región I- es rodeada, como condición de contorno, por otra donde los átomos se suponen se desplazan armónicamente -región II- de acuerdo al defecto a simular. La posición de los átomos de I se relaja numéricamente minimizando la energía del conjunto.

La técnica de simulación se comenzó a usar en el año 1965 para calcular la estructura del núcleo de dislocaciones (10, 11).

La limitación inicial estaba dada por la técnica numérica de relajamiento de la energía y las limitaciones de computación. Estas dificultades se hallan actualmente superadas, el programa numérico utilizado por nosotros fué desarrollado por Norgett et al (12) y se basa la minimización en el método muy eficiente, desde el punto de vista tiempo de computación, de los gradientes conjugados (13). La principal limitación de los resultados obtenidos a través de esta técnica, común también a la de función de Green, consiste en la validez de los potenciales interatómicos utilizados, tema que trataremos en la siguiente sección.

#### 2.4) Potenciales interatómicos.

En el cálculo en la configuración de defectos se suelen utilizar potenciales de interacción de a pares de átomos. Para generar estos potenciales o bien se supone la validez de la fórmula de funciones de interacción deducidas en forma más o menos básica y se les parametriza utilizando ciertas propiedades físicas del material o, más comunmente, se elige una forma numéricamente sencilla a fin de ajustar a estas propiedades físicas (14). Evidentemente existe un gran grado de arbitrariedad en la definición de estos potenciales (5). Otra aproximación para definir potenciales interatómicos basada en principios básicos, válida solo para cristales donde las capas electrónicas que rodean al ion no se tocan o superponen, es suponer interacción débil entre los iones y los electrones de conducción.

Se puede construir entonces un conjunto de elementos de matriz pequeños u operadores de energía debidos a la interacción entre iones individuales (16). Puede luego suponerse que estos operadores, llamados pseudopotenciales de los iones individuales, son simplemente función de las posiciones de los iones. Estas funciones pueden factorizarse en un factor dependiente de la estructura y otro del volumen por átomo. La representación en el espacio real de los factores dependientes de la estructura puede considerarse como un potencial efectivo de interacción ion-ion. Simulación de defectos utilizando pseudopotenciales fueron realizadas por Popovic et al (17) y Torrens y Gerl (18) y basándose esta interacción en principios más básicos que la de los potenciales empíricos deberían resultar más confiables. Veremos, sin embargo al discutir la aplicación a cristales hexagonales en la sección 3 las limitaciones de estos potenciales.

En general las aproximaciones mencionadas sufren de la severa limitación de considerar solo la interacción entre pares de iones suponiendo invariables los términos de volumen o de interacción entre más de dos cuerpos. Trabajos recientes tienden a destacar la importancia de estos términos (15,19), pero aún hoy no existe un tratamiento sistemático de los mismos en los cálculos de configuración de defectos.

2.5) Discusión sobre las técnicas de cálculo, validez en los resultados.

En las secciones anteriores hemos descrito las técnicas de cálculo de la estructura de defectos en una red discreta, destacando la necesidad de considerar el carácter discreto de la red. Esto se verá reafirmado por las aplicaciones que se discutirán en próximas secciones. En esta sección deseamos discutir la validez de los resultados obtenidos por estas técnicas y comparar las bondades relativas de cada una. Tal cual se desprende de la sección 2.4 la principal incerteza en estos cálculos se debe a la elección del potencial de interacción entre los iones. En general este potencial se ajusta a propiedades conocidas de la red y, a través del cálculo de la estructura del defecto, se extrapola de esta zona conocida a aquella desconocida para ajustar luego, si es posible, nuevamente los cálculos a resultados experimentales en este sentido una de las series más completas de trabajos son (12), (20) y (21). O sea que todo el proceso se podría resumir como un complejo ajuste de funciones a parámetros conocidos y extrapolación. El mayor riesgo de este cálculo es el suponer que se están calculando propiedades de un dado material. En general se debe a lo sumo esperar que las propiedades geométricas, de simetría de la red, sean suficientemente dominantes como para que el resultado del cálculo esté determinado por éstas. Siendo este cálculo, entonces, una herramienta útil para comprender mejor la naturaleza intrínseca del defecto estudiado.

Respecto a las ventajas de una técnica de cálculo frente a la otra, evidentemente la simulación por computadora presente la ven-

taja de calcular el núcleo del defecto admitiendo el carácter totalmente anarmónico de la interacción entre átomos en la red. La técnica de función de Green si bien incluye la anarmonicidad en la interacción directa entre el centro de distorsión, el defecto, y los átomos de la red, acepta la validez de la respuesta armónica para la interacción entre átomos de la red que contiene el defecto. Esta aproximación puede resultar muy grosera para defectos que provocan gran distorsión y hacen dudosos algunos de los resultados obtenidos.\* Por otro lado la técnica de función de Green tiene la ventaja de permitir visualizar en forma sencilla la influencia de la simetría de la red en la configuración resultante.

### 3.) Configuración de defectos.

3.1) Simetría de vacancias e intersticiales en redes hexagonales compactas.

En primer orden el defecto queda totalmente definido por su tensor dipolar asociado. La simetría de defectos en redes (cúbicas) ha sido discutida en la literatura - por ejemplo - (4,25,26,27). Estos defectos en la estructura hexagonal compacta no han sido considerados en igual detalle. El tensor dipolar puede expresarse fácilmente en la aproximación de fuerzas centrales entre el defecto y los átomos de la red.

#### 3.1.a) Vacancia (figura 1 a)

Suponemos que la ausencia de un átomo de la red en el origen

\* Esta restricción también es válida cuando se discuten efectos que dependen de las derivadas del campo de fuerza que genera el defecto (22).

genera un campo de fuerzas efectivo en los átomos vecinos. Llamaremos  $f^{(i)}$  a las fuerzas radiales actuantes sobre el vecino (i) y  $r^{(i)}$  su distancia al origen. Las diferentes contribuciones al tensor dipolar según el alcance de la interacción efectiva se hallan reunidas para los vecinos más cercanos en la Tabla I 
$$P_{ij} = \sum_{(i)} P_{ij}^{(i)} \quad (9)$$
 Vemos que para la relación  $c/a$  diferente de la resultante de apilamientos de esferas rígidas este tensor es anisotrópico aún considerando sólo interacción a primeros vecinos si la relación  $c/a$  coincide con la resultante del apilamiento de esferas rígidas -  $c/a = \sqrt{8/3}$ - el primero y segundo vecino de la Tabla I pasan a ser ambos primeros vecinos

En este caso el tensor dipolar resulta esféricamente simétrico para un potencial efectivo de interacción con alcance inferior a "c".

### 3.1.b) Intersticial octaedral (figura 1.b)

En la Tabla I se resumen las contribuciones de los tres primeros vecinos del átomo intersticial al tensor dipolar. Vemos, que al igual que en la vacancia, si el apilamiento atómico corresponde al de esferas rígidas para un potencial efectivo limitado a las dos primeras capas de vecinos el tensor dipolar presenta simetría esférica. En cambio al introducir una interacción efectiva hasta el tercer vecino aparece una contribución a la anisotropía debida a la simetría del sitio octaedral (figura 1c).

El intersticio comunmente llamado tetraedral en estas redes, por analogía con las redes cúbicas, en realidad corresponde a una si-

Tabla I

## Tensores dipolares de autodefectos en redes hexagonales compactas

Defecto	vecino *	$r^{(i)}$	$i$	$n^{**}$	$p_1^{(i)} = p_2^{(i)}$	$p_3^{(i)}$
Vacancia	$(1/2, 1/2\sqrt{3}, c/2a)$	$a\sqrt{\frac{1}{3} + \frac{c^2}{4a^2}}$	1	6	$a^2 f^{(1)}/r^{(1)}$	$3/2 c^2 f^{(1)}/r^{(1)}$
	$(1, 0, 0)$	$a$	2	6	$3a^2 f^{(2)}/r^{(2)}$	-
	$(0, 2/\sqrt{3}, c/2a)$	$a\sqrt{\frac{4}{3} + \frac{c^2}{4a^2}}$	3	6	$4a^2 f^{(3)}/r^{(3)}$	$3/2 c^2 f^{(3)}/r^{(3)}$
	$(0, 0, c)$	$c$	4	2	-	$2 c^2 f^{(4)}/r^{(4)}$
Intersticial	$(0, 1/\sqrt{3}, c/4a)$	$a\sqrt{1/3 + c^2/16a^2}$	1	6	$a^2 f^{(1)}/r^{(1)}$	$3c^2/8 f^{(1)}/r^{(1)}$
Octaedral	$(0, 2/\sqrt{3}, c/4a)$	$a\sqrt{4/3 + c^2/16a^2}$	2	6	$4a^2 f^{(2)}/r^{(2)}$	$3c^2/8 f^{(2)}/r^{(2)}$
	$(0, -1/\sqrt{3}, 3c/4a)$	$a\sqrt{1/3 + 9c^2/16a^2}$	3	6	$a^2 f^{(3)}/r^{(3)}$	$27c^2/8 f^{(3)}/r^{(3)}$
Intersticial	$(1/2, 1/2\sqrt{3}, x_3)$	$a\sqrt{1/3 + x_3^2}$	1	3	$a^2/2f^{(1)}/r^{(1)}$	$3x_3^2 a^2 f^{(11)}/r^{(1)}$
Tetraedral	$(0, 0, c/2a + x_3)$	$c/2 - ax_3$	2	1	-	$(c/2 - ax_3)^2 f^{(2)}/r^{(2)}$
	$(0, 0, c/2a - x_3)$	$c/2 + ax_3$	3	1	-	$(c/2 + ax_3)^2 f^{(3)}/r^{(3)}$
	$(1, 0, c/2a - x_3)$	$a\sqrt{1 + (c/2a - x_3)^2}$	4	6	$3a^2 f^{(4)}/r^{(4)}$	$6(c/2a - x_3)^2 f^{(4)}/r^{(4)}$
	$(0, 2/\sqrt{3}, x_3)$	$a\sqrt{4/3 + x_3^2}$	5	3	$2a^2 f^{(5)}/r^{(5)}$	$3x_3^2 a^2 f^{(5)}/r^{(5)}$

\* Coordenadas en unidades de  $[a]$  - parámetro de la red - de uno de los átomos que se hallan a la distancia  $r^{(i)}$ .

\*\* Número de átomos contribuyentes al tensor dipolar.

metría muy diferente a la del tetraedro. Este intersticio determinado por tres átomos en un plano compacto y un átomo del plano compacto en la red hexagonal compacta pierde la simetría de inversión, característica de la red cúbica centrada en las caras. Esto implica que la posición del intersticial en la dirección  $c$  no se halle determinada por la simetría del intersticio. La nomenclatura de tetraedral a este sitio es desafortunada pues una descripción geométrica de su simetría implica considerar al menos 5 átomos en 3 planos compactos. En la tabla I se resumen las contribuciones de los primeros vecinos del intersticial al tensor dipolar. A los fines de cálculo la distancia  $x_3$ , que aparece en esta tabla y define la ubicación del intersticial en el intersticio surge de imponer la condición (3). Por lo tanto la distorsión generada por el defecto en el límite elástico se halla definida por (5). La anisotropía del tensor dipolar, al igual que en los defectos anteriormente mencionados, depende de la relación  $c/a$  y el alcance efectivo de la interacción entre el defecto y la red.

Para una red con un  $c/a$  coincidente con el de apilamiento de esferas rígidas y un alcance efectivo hasta los 4 átomos primeros vecinos,  $x_3$  se halla determinado por la condición de equidistar el intersticial con respecto a estos átomos y el tensor resulta esféricamente simétrico.

3.2) Cálculo de la configuración de autodefectos en redes hexagonales compactas.

3.2.a) Potenciales interatómicos.

Hemos generado potenciales empíricos de interacción entre áto-



mos de la red hexagonal compacta. El utilizado para los cálculos del próximo párrafo está constituido por un conjunto continuo de cúbicas con derivadas primeras y segundas continuas en los puntos de empalme. Un bloque de cristal, limitado volumétricamente por un contorno fijo, se mantiene bajo este potencial estable en la estructura hexagonal de apilamiento compacto de esferas rígidas. El alcance del potencial es inferior a la distancia al cuarto vecino del origen. Se ajustó este potencial para reproducir en el límite de ondas largas (28) las constantes elásticas del magnesio y una energía de formación de la vacancia de .8 eV (29).

Se analizaron las funciones de interacción ion-ion en los pseudopotenciales "recomendados" por Heine y Appapillai (30) para los metales hexagonales Be, Cd, Mg, Tl y Zn. Para que estos potenciales sean utilizables en cálculos de simulación de defectos y mantengan una estructura estable deben cumplir ciertas condiciones tales como la de anular las tensiones anisotrópicas - condición de Huang (28) - y ajustar constantes elásticas razonables en el límite de ondas largas. La primera restricción nos permite determinar cuantos átomos vecinos incluir en la interacción (alcance efectivo del potencial), la segunda la validez de efectuar cálculos con un dado potencial. Analizando los potenciales de Heine y Appapillai (30) surge que para el caso del Mg se obtiene un potencial de interacción que cumple las restricciones anteriores si su alcance se limita al noveno o al diecisieteavo vecino, este es el que se usa para los cálculos del próximo párrafo. Para el caso

de Tl y uno de los potenciales para Be pocos vecinos son necesarios para satisfacer la condición de Huang pero las constantes elásticas parecen ser mayores que las experimentales. Los potenciales deducidos para Cd y Zn por Heine y Appapillai no dan valores razonables de las constantes elásticas (estas llegan a hacerse negativas en algunos casos.)

#### 4.2.b) Configuración de autodefectos.

Utilizando los potenciales interatómicos y los métodos anteriormente descritos se calculó la configuración de la vacancia y el intersticial octaedral y el tetraedral. El resultado más extenso de estos cálculos será el objeto de una publicación futura (31). En esta deseamos mencionar que, pese a ser el intersticio tetraedral más pequeño que el octaedral, la magnitud del relajamiento en el primero es de tal magnitud que para ambos potenciales y técnicas de cálculo resulta el auto-intersticial tetraedral el defecto estable. Este adopta una configuración tal que el átomo extra produce un gran desplazamiento de su primer vecino en la dirección del eje cristalográfico "c", desplazándose el mismo del centro del tetraedro hacia este vecino. En principio la configuración de este sitio es tal que puede existir más de una posición estable del intersticial en la dirección "c". En los cálculos solo en el caso en que se utiliza el pseudopotencial de Heine y Appapillai (30) para Mg se obtiene más de una posición de equilibrio.

Pese a las asimetrías características de la vacancia y el intersticio octaedral, discutidas en la sección anterior, el tensor di-

polar resulta aproximadamente con simetría esférica (anisotropías inferiores al 10% de diferencia entre los valores principales del tensor dipolar para el intersticial octaedral). Para el intersticial tetraedral este tensor es altamente anisotrópico. En la Tabla II se resumen los valores calculados de los componentes principales de este tensor. Las posiciones I y II son las dos posiciones de equilibrio para el mismo potencial. Es de notar que la posibilidad de existencia de mas de una configuración de equilibrio del intersticial puede dar lugar a fenómenos anelásticos por relajamiento entre una posición y la otra ante una fuerza aplicada. El valor negativo de la traza del tensor dipolar que se obtiene utilizando el potencial empírico proviene de interacciones que no se han parametrizado con ninguna variable física y puede considerarse como una anomalía del potencial.

Tabla II

Tensor dipolar del intersticial tetraedral

<u>Potencial empírico</u>		<u>Seudopotencial (Heine y Appapillai (30))</u>			
		<u>Posición I</u>		<u>Posición II</u>	
$P_{11} = P_{22}$ (eV)	$P_{33}$ (eV)	$P_{11} = P_{22}$ (eV)	$P_{33}$ (eV)	$P_{11} = P_{22}$ (eV)	$P_{33}$ (eV)
-1.39	1.42	2.65	6.77	5.61	4.04

3.3) Intersticiales en redes cúbicas centradas en el cuerpo.

En publicaciones anteriores (5,6,9) se ha estudiado la distorsión generada por una impureza intersticial en metales de transición de estructura cúbica centrada en el cuerpo. El método general de cálculo utilizado fué el deducir un potencial efectivo de interacción defecto-red a partir de mediciones de relajamiento anelástico y parámetro de la red. Este potencial se utilizó para calcular la distorsión de la red a través del método de función de Green. En esta queremos mostrar, como resultado complementario de los anteriores, como esta distribución se propaga a los átomos vecinos no afectados por el potencial efectivo en forma directa. En la figura 2 se esquematizan los 6 primeros vecinos del intersticial octaedral y en la Tabla III los desplazamientos radiales de este intersticial en los cálculos de impurezas de N y O en V y Nb. Vemos que el gran desplazamiento de los vecinos 1 impulsa a todos aquellos ubicados en planos perpendiculares al eje 01 a moverse hacia el intersticio; arrastrando, sin embargo, el vecino 1 en su desplazamiento alejándose del intersticio a vecinos que se hallan aproximadamente en la dirección 01 como el 4 y el 5.

Finalmente queremos mencionar que utilizando la aproximación desarrollada por Savino (22) el cambio de constantes elásticas de la red debida a las impurezas puede ser calculado. Este cálculo será el objeto de una publicación futura. En esta solo adelantamos que la configuración tetraedral para el intersticial de hidrógeno en metales de transición parece ser aquella, en que los cálculos de cambio de constantes elásticas mejor ajustan los resultados experimentales.

## 4.) Resumen.

En este trabajo se han resumido las técnicas de cálculo de defectos en redes cristalinas. Se ha discutido la validez de estas y las ventajas comparativas de la simulación por computadora frente a la técnica de función de Green estática. Se ha discutido luego la configuración de autodefectos en redes hexagonales compactas y presentado resultados utilizando potenciales de interacción atómica de carácter empírico y pseudopotenciales. La validez de estos últimos se ha admitido solo cuando ajustan las constantes elásticas en el límite de ondas largas. Finalmente se han presentado cálculos complementarios de publicaciones anteriores con respecto a la configuración de intersticiales en redes cúbicas centradas en el cuerpo.

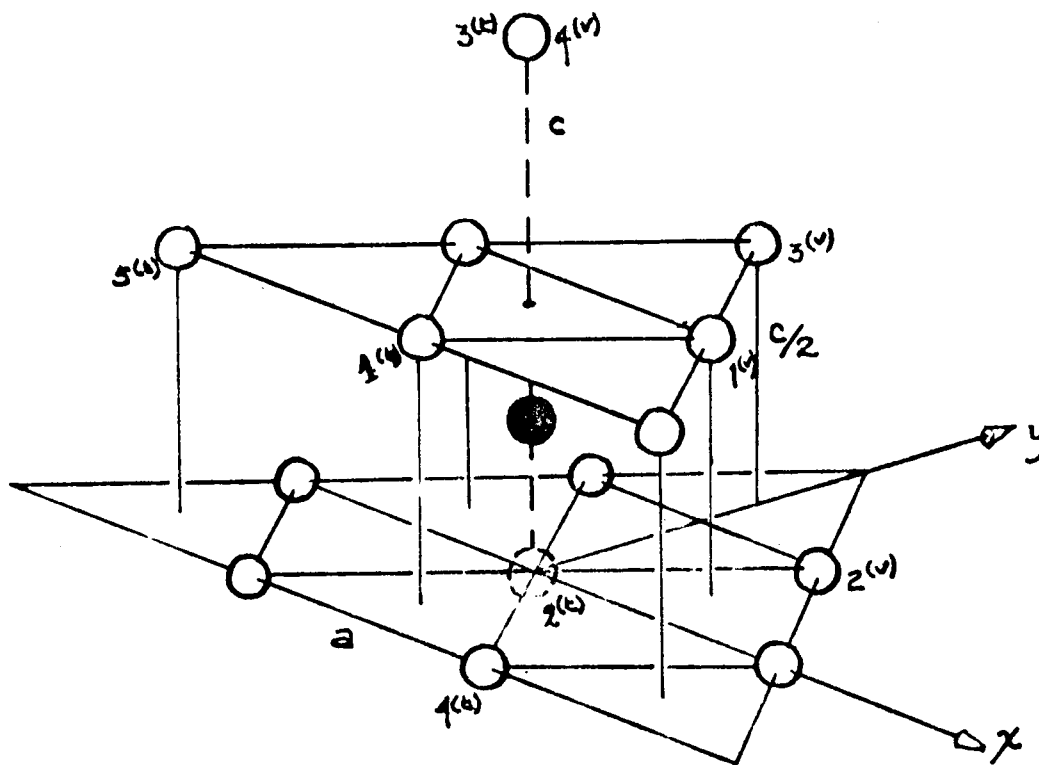
Tabla III

Desplazamiento radial, en unidades de 1/2 parámetro de red, de los primeros vecinos a intersticiales octaedrales en redes cúbicas centradas en el cuerpo (figura 2)

Vecino	1	2	3	4	5	5'	6
Distancia al intersticial (a/2)	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{5}$	$\sqrt{6}$	$\sqrt{9}$	$\sqrt{9}$	$\sqrt{10}$
V - N	.319	-.011	-.016	.062	.082	-.003	-.007
V - 0	.326	-.015	-.012	.063	.084	-.004	-.008
Nb - N	.313	.002	-.016	.051	.099	.001	-.010
Nb - 0	.281	.018	-.014	.044	.088	.004	-.006

- 1) J.D. Eshelby; Solid State Physics, Vol.3, editores F. Seitz, D. Turnbull (New York, Academic Press) (1956).
- 2) J.P. Hirth, J. Lothe (McGraw Hill Book Company) (1968)
- 3) H. Kan zaki; J.Phys.Chem.Solids 2, 24 (1957).
- 4) V.K.Tewary; Adv.Phys. 22, 757 (1973).
- 5) C.E. Laciana, A.J. Pedraza, E.J. Savino. Publicación ICTP IC/77/76 (1977).
- 6) V.K. Tewary J. Phys. F.: Metal Phys. 3, 1515 (1973).
- 7) R. Bullough, V.K. Tewary in "Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects", Editores P.C. Gehlen, J.R.Beeler Jr. y R.I. Jaffe (New York, Plenum Press), pag.155 (1972).
- 8) M.R. Schober, M. Mostoller y P.M. Dederichs; Phys.Stat.Sol. (b) 64, 1973 (1974).
- 9) C.E. Laciana, A.J. Pedraza, E.J. Savino. A ser publicado Phys.Stat. Sol.(a) 47 (1978).
- 10) R. Bullough; Bull.Amer.Phys.Soc. 10, 323 (1965).
- 11) R.M.J. Cotterill y M.Doyoma; Phys.Rev. 145, 465 (1966).
- 12) M.J. Norgett, R.C. Perrin y E.J. Savino; J. Phys.F: Metal Phys. 2, L73 (1972)..
- 13) R. Fletcher y C.M. Reeves, Comput.J. 7, 149 (1964).
- 14) I.M. Torrens; Interatomic Potentials (Academic Press) (1972).

- 15) R.A. Johnson; J.Phys.F: Metal Phys. 3, 295 (1973).
- 16) W.A. Harrison; Pseudopotentials in the Theory of Metals (New York, Benjamin) (1966).
- 17) Z.D. Popovic y J.P. Carbotte; J. Phys.F: Metal Phys. 4, 351 (1974).
- 18) J.M. Torrens y M. Gerl Phys.Rev. 187, 912 (1969).
- 19) M.W. Finnis y M. Sachdev; J. Phys.F.: Metal Phys. 6, 965 (1976).
- 20) R.C. Perrin y E.J. Savino; J. of Microscopy 98, 214 (1973).
- 21) E.J. Savino y R.C. Perrin; J. of Phys.F: Metal Phys. 4 , 1889 (1974)
- 22) E.J. Savino; Phil.Mag. 36, 323 (1977).
- 23) J.D. Eshelby en Solid State Physics 3 Editado por F. Seitz, D. Turnbull (New York, Academic Press) (1956).
- 24) P.H. Dederichs, C. Lehmann y A. Scholz; Z.Phys.B 20, 155 (1975).
- 25) D.N. Beshers; J. Appl. Phys. 36, 290 (1965).
- 26) R. Bullough, M.J. Norgett y S.Webb; J.Phys.F: Metal Phys. 1, 345 (1971)
- 27) A. Seeger, E. Mann y R.v.Jan; J.Phys.Chem. Solids 23, 639 (1962).
- 28) M. Born y K. Huang, The Dynamical Theory of Crystal Lattices (Clarendon Press, Oxford) (1954).
- 29) C. Mairy, J. Hillairet y D. Schumacher Act. Met. 15, 1258 (1967).
- 30) Heine y M.Appapillai, Informe interno Cambridge.55T / 7 / 1972.
- 31) A.M. Monti, C.N. Tomé y E.J. Savino, a ser publicado.



Figuras 1a) y 1c)

Configuración de la vacancia y el intersticial tetraedral en redes hexagonales compactas; átomos (v) vecinos de la vacancia, (t) del intersticial.



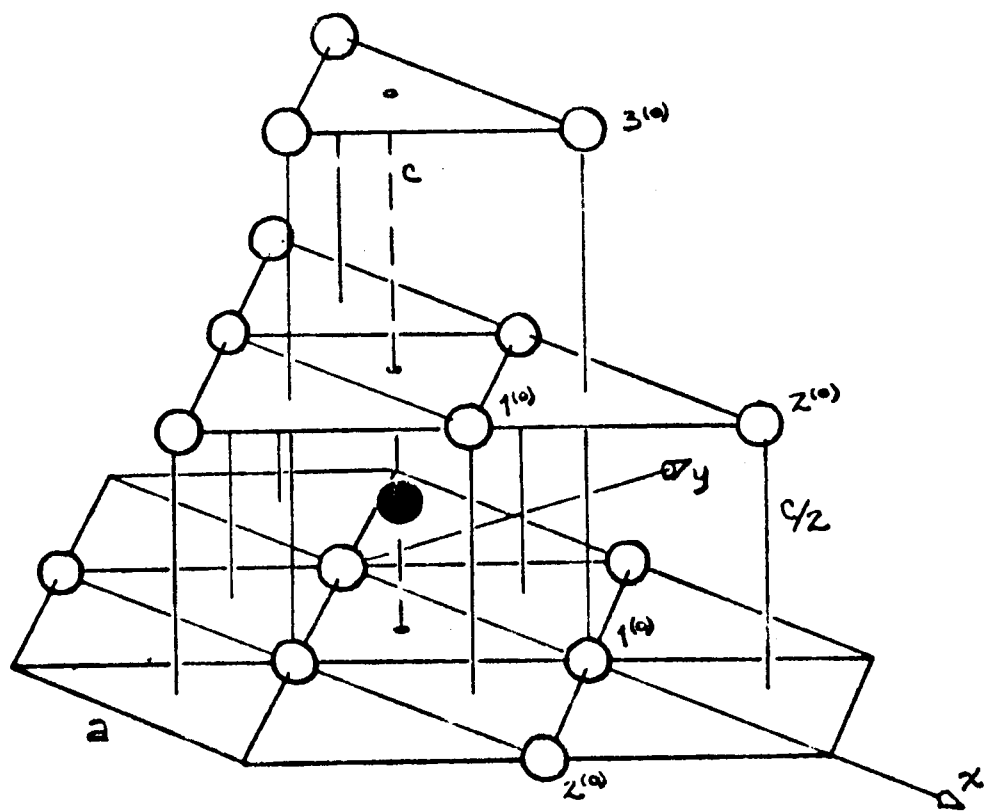


Figura 1 b

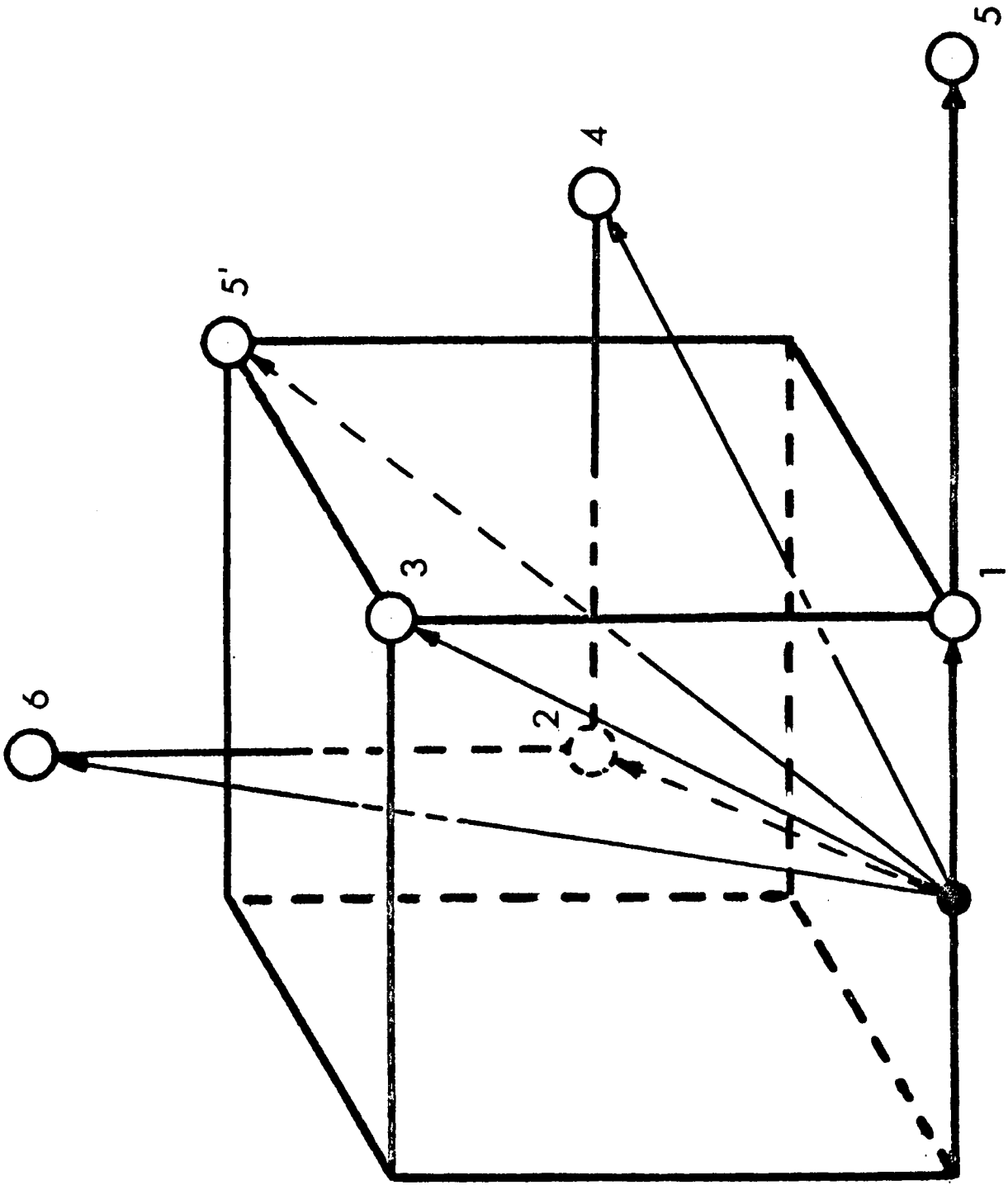


Figura 2