

Una teoría discreta de dislocaciones en redes cristalinas

M.P. Ariza y M. Ortiz

Universidad de Sevilla

California Institute of Technology



MPA & MO
Carlos III 02/05

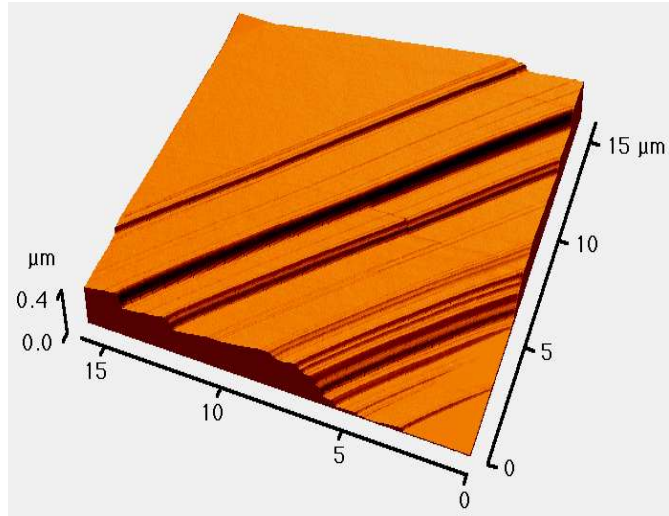
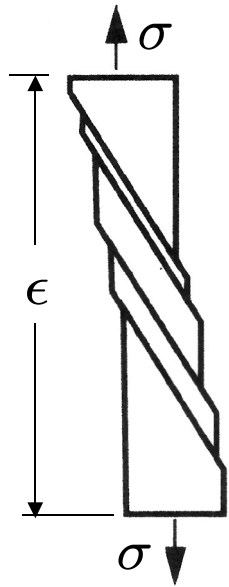
Índice

- La teoría discreta de redes cristalinas y defectos:
 - *Cálculo discreto en redes*
 - *Teoría discreta de dislocaciones*
- Cálculo diferencial en redes
- Aplicación a elasticidad de redes:
 - *Existencia y unicidad de soluciones*
 - *Paso al límite del continuo*
- Ejemplos de aplicación:
 - *Energías de núcleos de dislocación en cristales BCC*
 - *Campos de deslizamiento en equilibrio y distribución de dislocaciones alrededor de un punto de dilatación*

Motivación

- Tratamiento clásico redes cristales.
(Born & Huang (1954), Mura (1987))
- Dinámica de dislocaciones: comportamiento plástico de cristales metálicos.

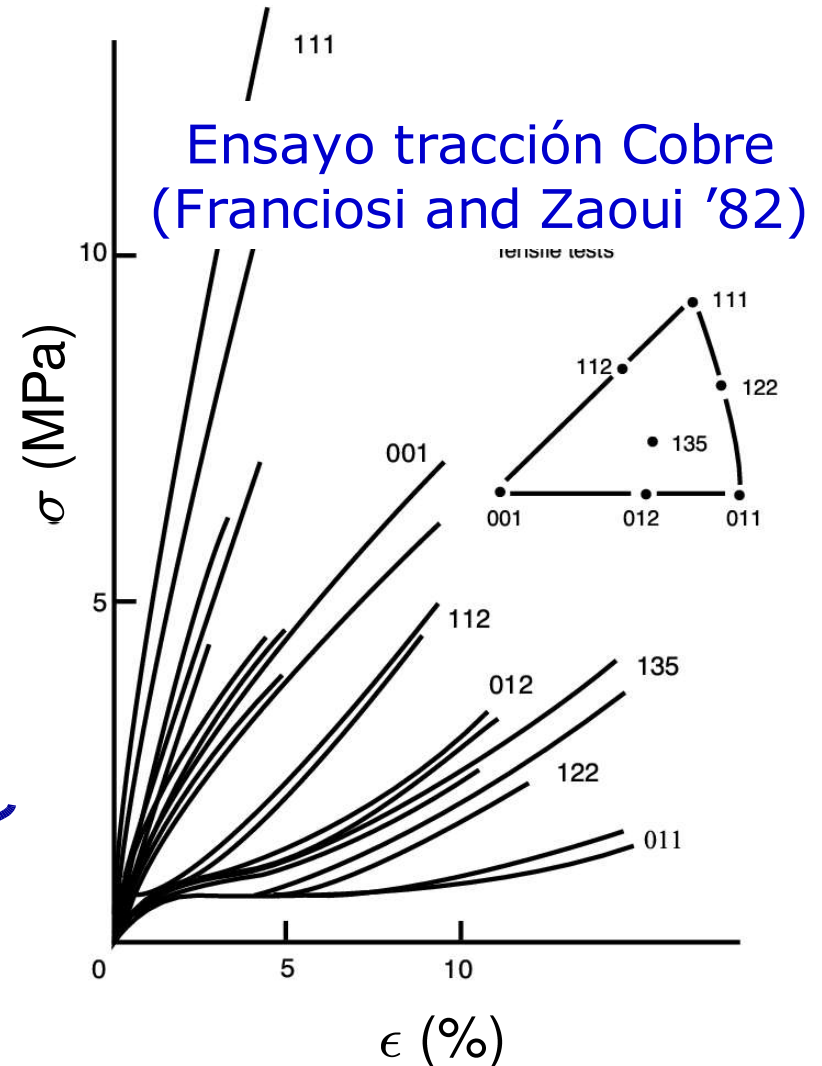
Plasticidad cristales – Comportamiento Macroscópico



Marcas deslizamiento
superficie de cristales
(AFM, C. Coupeau)

Ensayo tracción
uniaxial

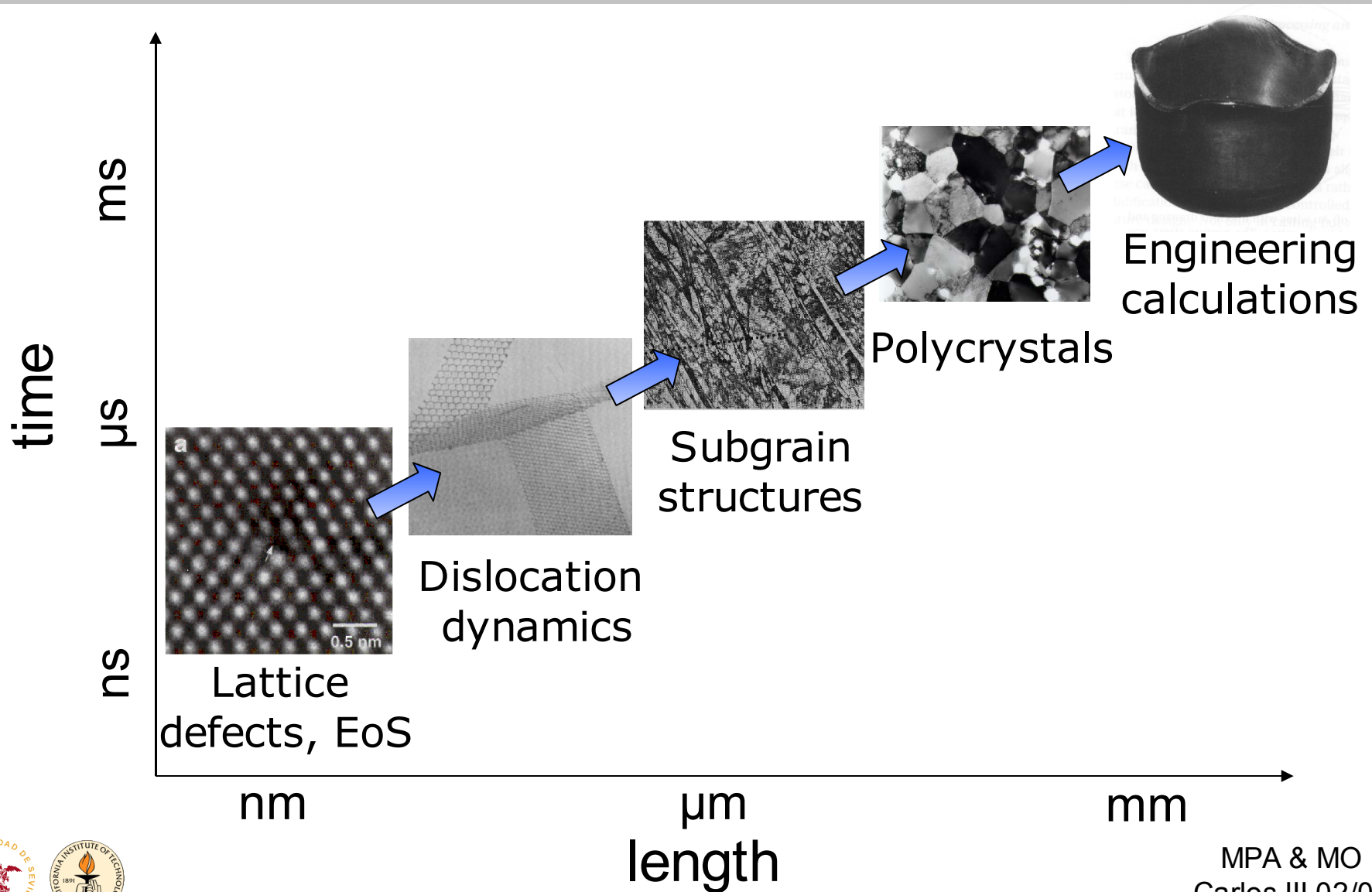
Acomodación irreversible del
cortante por planos cristalográficos



Motivación

- Tratamiento clásico redes cristales.
(Born & Huang (1954), Mura (1987))
- Dinámica de dislocaciones: comportamiento plástico de cristales metálicos.
- Modelización multiescala de metales.

Modelizacion multiescala

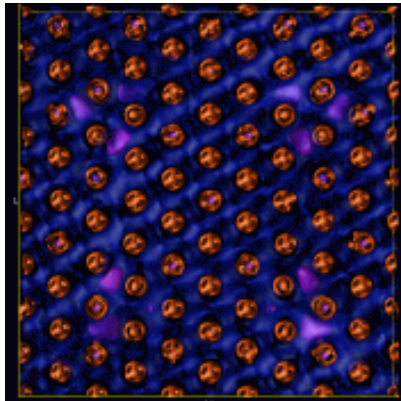


Motivación

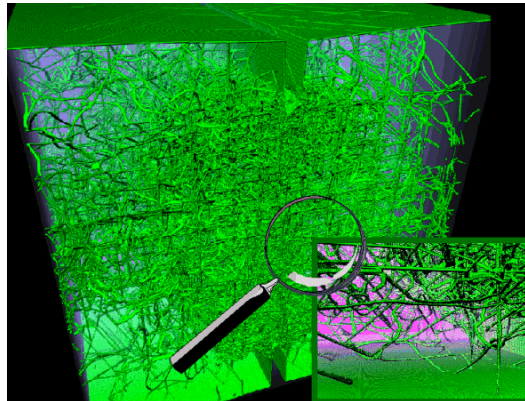
- Tratamiento clásico redes cristales.
(Born & Huang (1954), Mura (1987))
- Dinámica de dislocaciones: comportamiento plástico de cristales metálicos.
- Modelización multiescala de metales.
- Métodos computacionales.

Métodos Computacionales

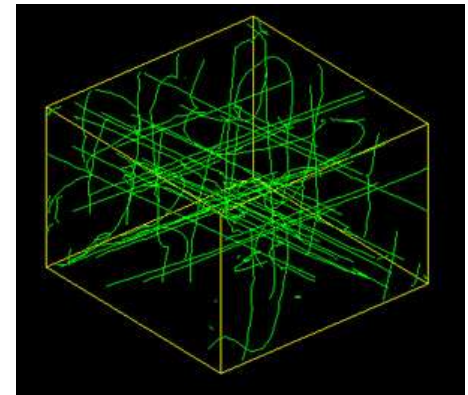
- Cálculos primeros-principios: Núcleos de dislocación, dipolos, cuadrupolos... $\sim 10^3$ átomos (T. Arias '00)
- Dinámica molecular: Potenciales empíricos $\sim 10^9$ átomos (F. Abraham '03)
- Elasticidad lineal: Dinámica de dislocaciones, $L \sim 10^6 b$, $\epsilon \sim 1\%$ (Bulatov et al. '03)



Ta cuadrupolo
(T. Arias '00)



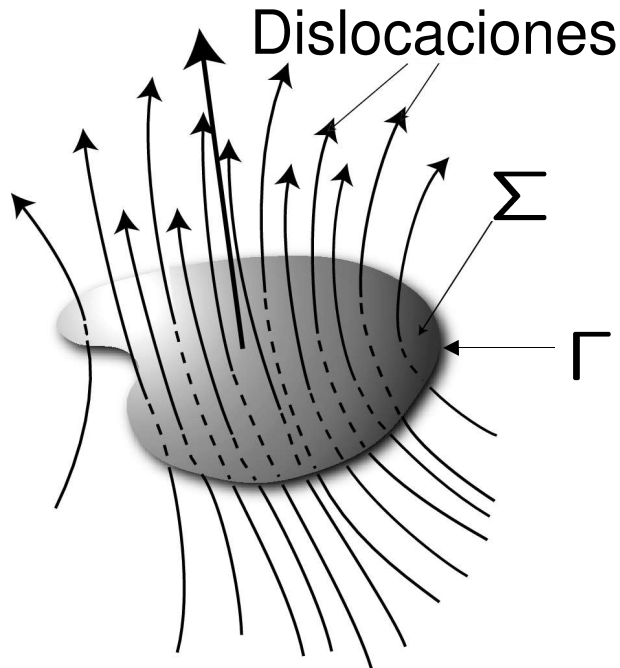
FCC fractura dúctil
(F.F. Abraham '03)



FCC dinámica dislocaciones
(M. Rhee et al. '02)

Dislocaciones elásticas-lineales

- Energia elastica: $E(\beta^e) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} c_{ijkl} \beta_{ij}^e \beta_{kl}^e dx$



- Vector Burgers total a traves Σ :

$$b_i(\Sigma) = \oint_{\Gamma} \beta_{ij}^e dx_j$$

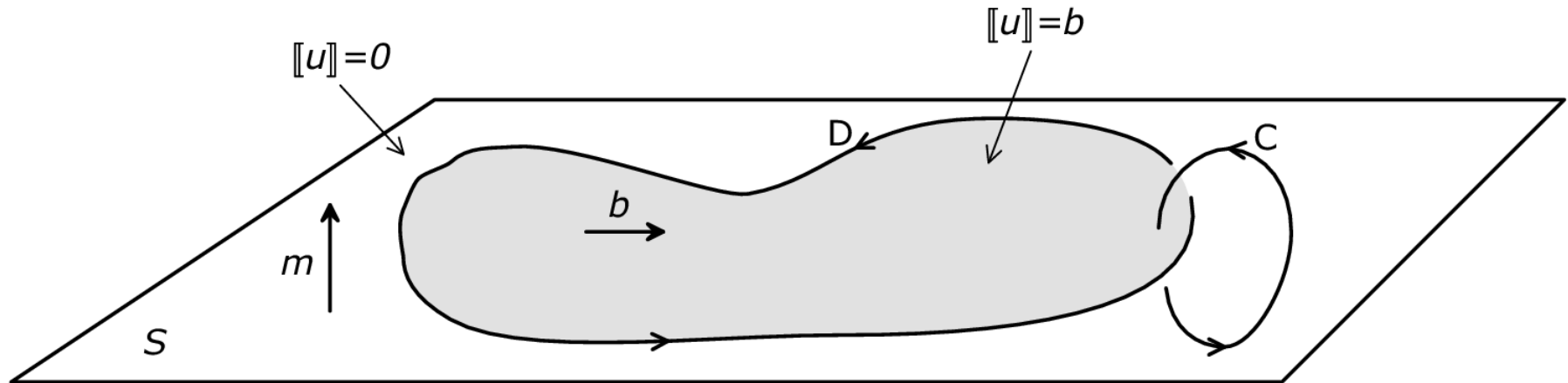
- Densidad dislocaciones (Nye 1953):

$$b_i(\Sigma) = \int_{\Sigma} \alpha_{il} n_l dS$$

- Formula de Kröner (1958): $\alpha_{il} = -\beta_{ij,k}^e e_{kjl}$

- Conservacion vector de Burgers: $\alpha_{il,l} = 0$

Dislocaciones elásticas-lineales



- Dislocacion de Volterra: $\int_C \beta_{ij}^e dx_j = -\text{Link}(C, D)b_i$

- Dipolo: $\frac{E}{L} \sim \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu^2)} \log \frac{R}{r_0} \rightarrow \infty$

como $r_0 \rightarrow 0$ (cut-off radio nucleo).

- Es necesario una teoria discreta!

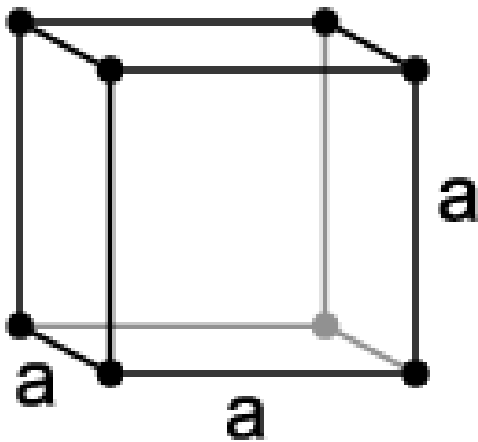
La teoría discreta

- Hemos desarrollado una teoría (discreta) de la elasticidad en cristales y defectos en cristales:
 - *Tiene en cuenta la geometría discreta de los cristales*
 - *Es tratable analíticamente*
- Los elementos de la teoría son:
 - *Cálculo discreto que proporciona las analogías discretas de operadores diferenciales como grad, div y curl*
 - *Teoría discreta de integración que proporciona la analogía discreta del teorema de Stokes*
 - *Estática de redes y autodeformaciones como forma de introducir defectos en la red*
 - *Transformada de Fourier discreta*

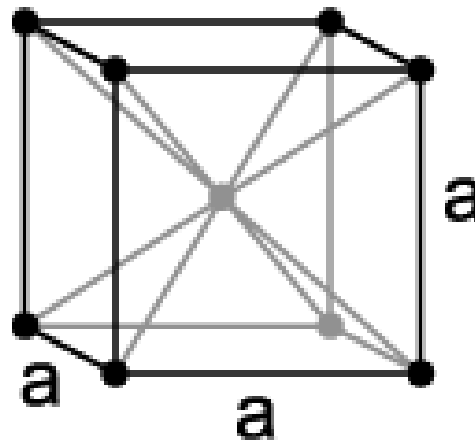
Idea clásica de redes cristalinas

- Red cristalina $\equiv$ subgrupo discreto de $\mathbb{R}^n$,

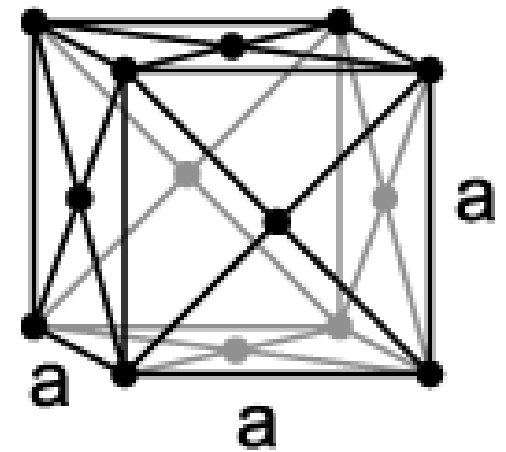
$$L = \{x(l) = l^i a_i, l \in \mathbb{Z}^n\}$$



Simple cubic
(SC)



Body-centered cubic
(BCC)



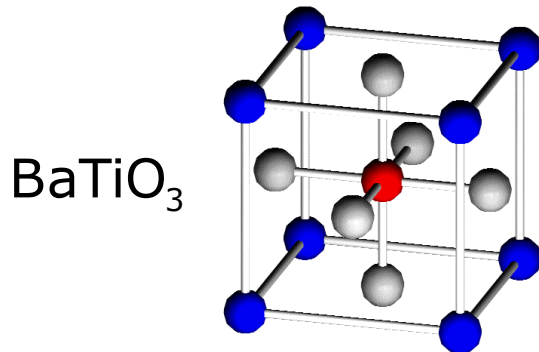
Face-centered cubic
(FCC)

Idea clásica de redes cristalinas

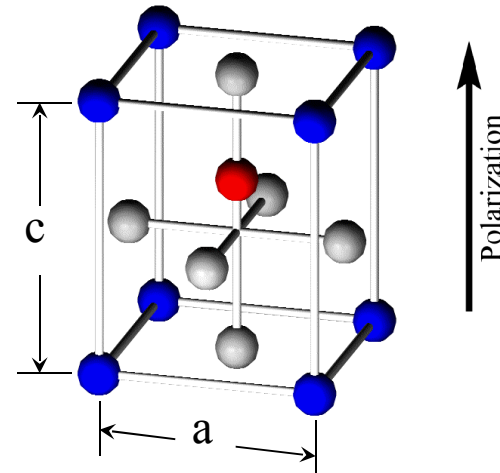
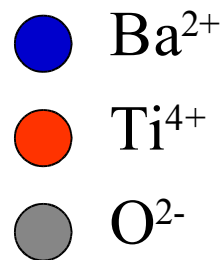
- Red compleja:

$$L = \{x(l, \alpha) = l^i a_i + r_\alpha, l \in \mathbb{Z}^n, \alpha = 1, \dots, N\}$$

N redes simples superpuestas desplazadas r_α



Cubica (alta temperatura)



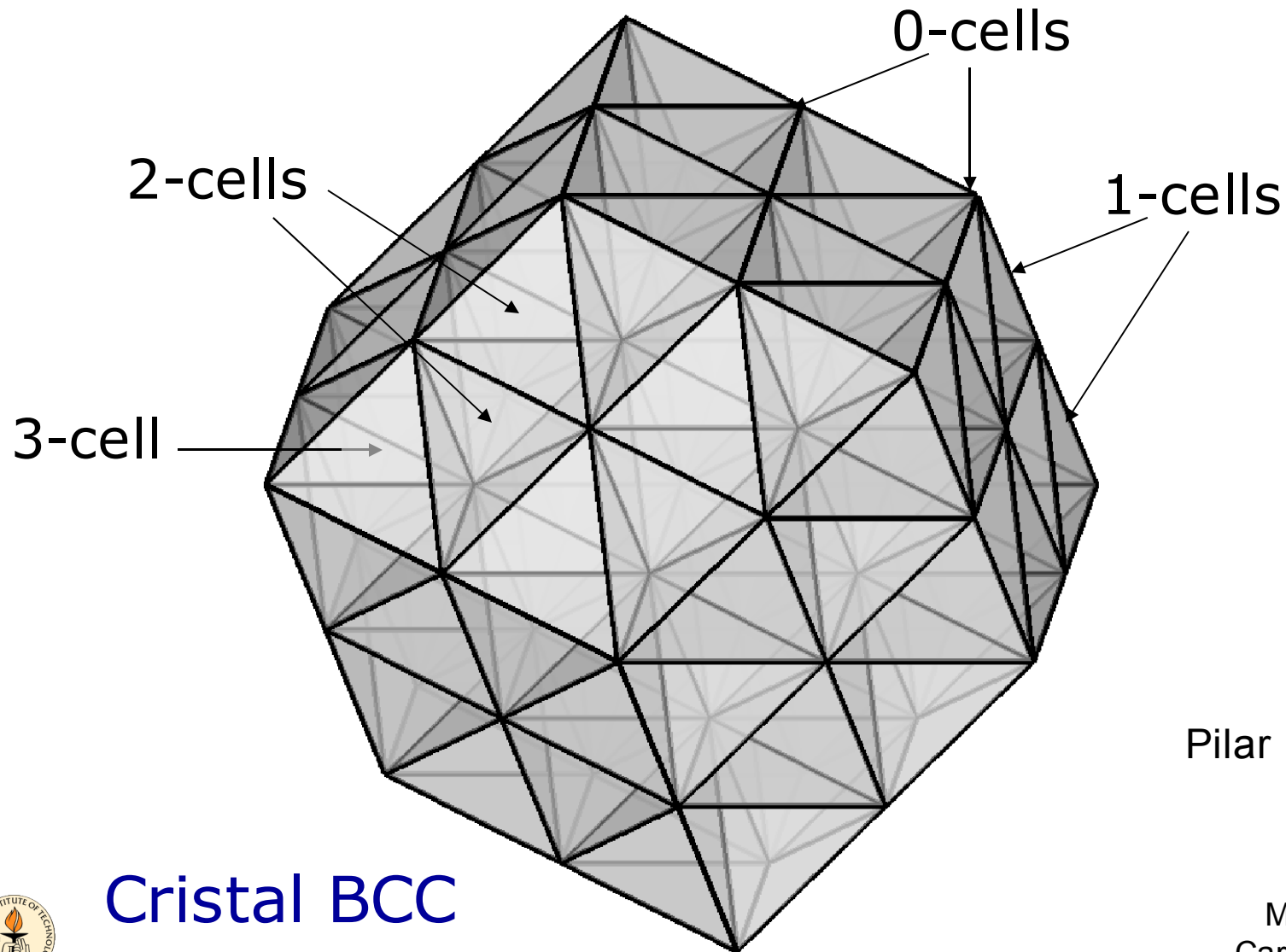
Tetragonal
(temperatura ambiente)

$$\frac{c}{a} = 1.01$$

Idea clásica de redes cristalinas

- Punto de vista clasico de cristales es adecuado para:
 - Simetria cristal, optica.
 - Redes estaticas, dinamica (fotones).
 - Termodinamica de cristales perfectos.
- Teoria clasica es deficiente para:
 - Geometria de defectos en redes discretas.
 - Mecanica, analisis de defectos en redes discretas.
- Es necesario: formas, operadores diferenciales, wedge product, linking number, integracion, teorema Stokes, calculo variacional... complejos diferenciales discretos!

Cristales como complejos diferenciales discretos



Cristal BCC

Complejo red BCC : 0-cells

- Numeracion del grupo 0-cell:

$$E_0 = \{e_0(l), l \in \mathbb{Z}^3\}$$

$$\epsilon_1 = (1, 0, 0)$$

$$\epsilon_2 = (0, 1, 0)$$

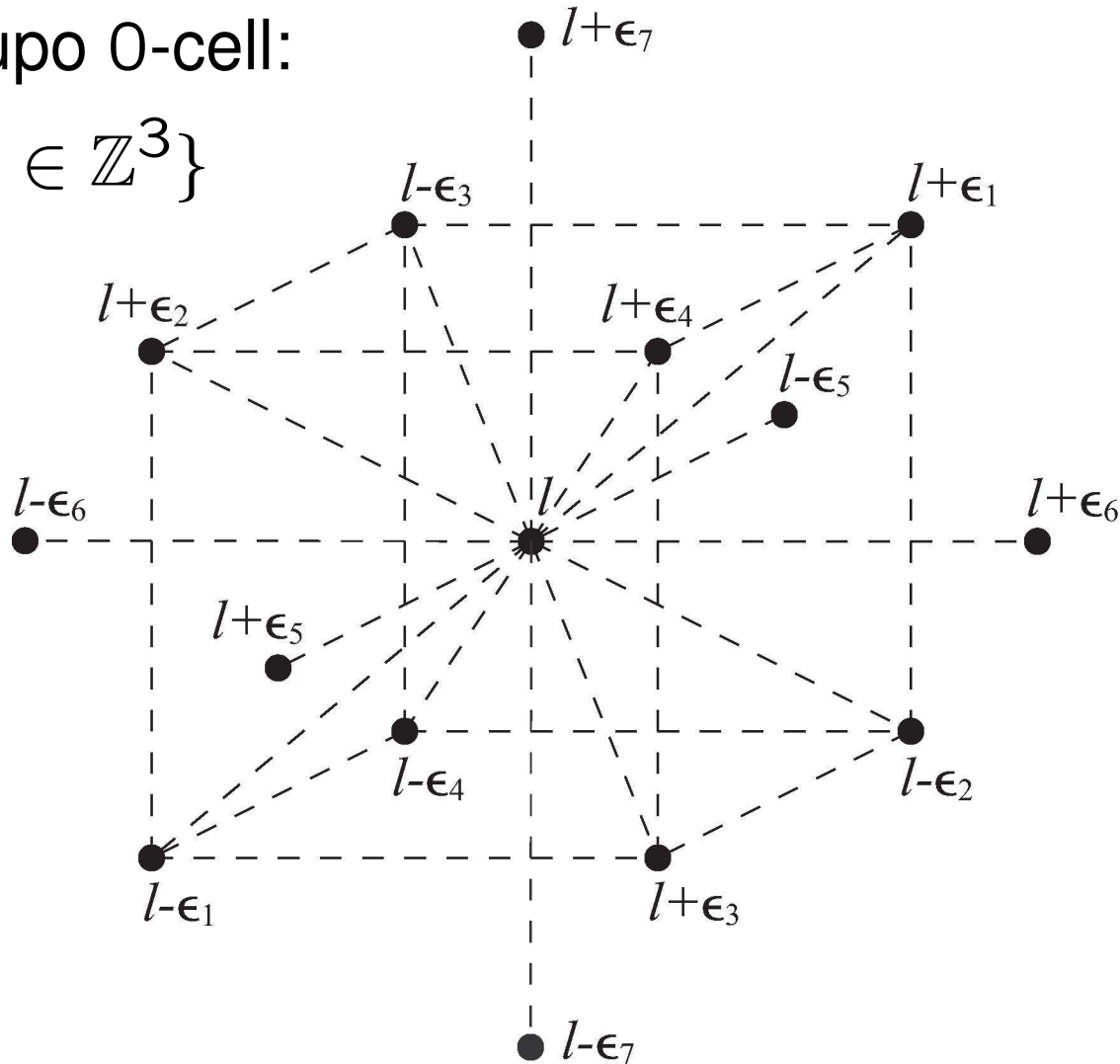
$$\epsilon_3 = (0, 0, 1)$$

$$\epsilon_4 = (1, 1, 1)$$

$$\epsilon_5 = (0, 1, 1)$$

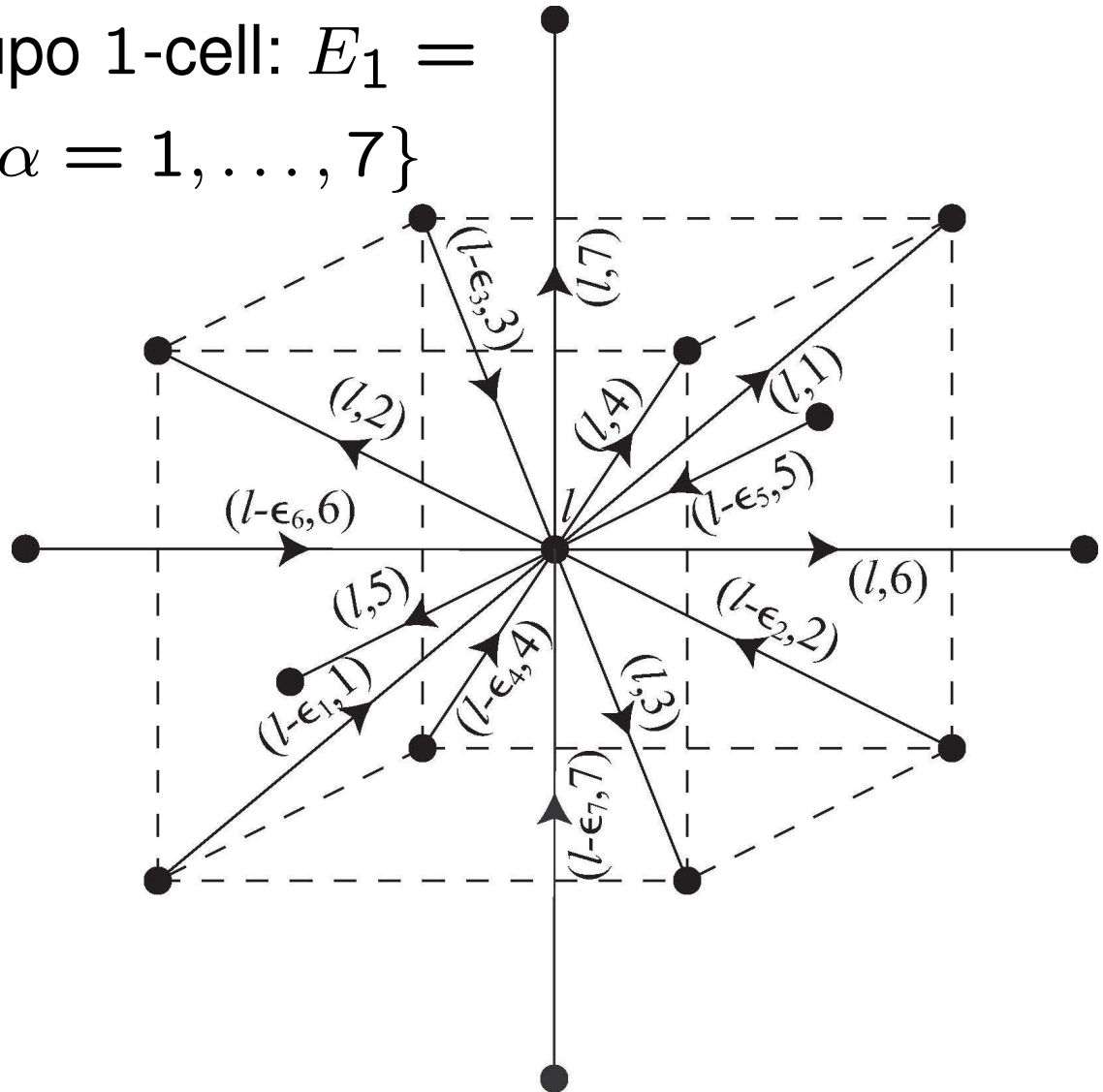
$$\epsilon_6 = (1, 0, 1)$$

$$\epsilon_7 = (1, 1, 0)$$



Complejo red BCC : 1-cells

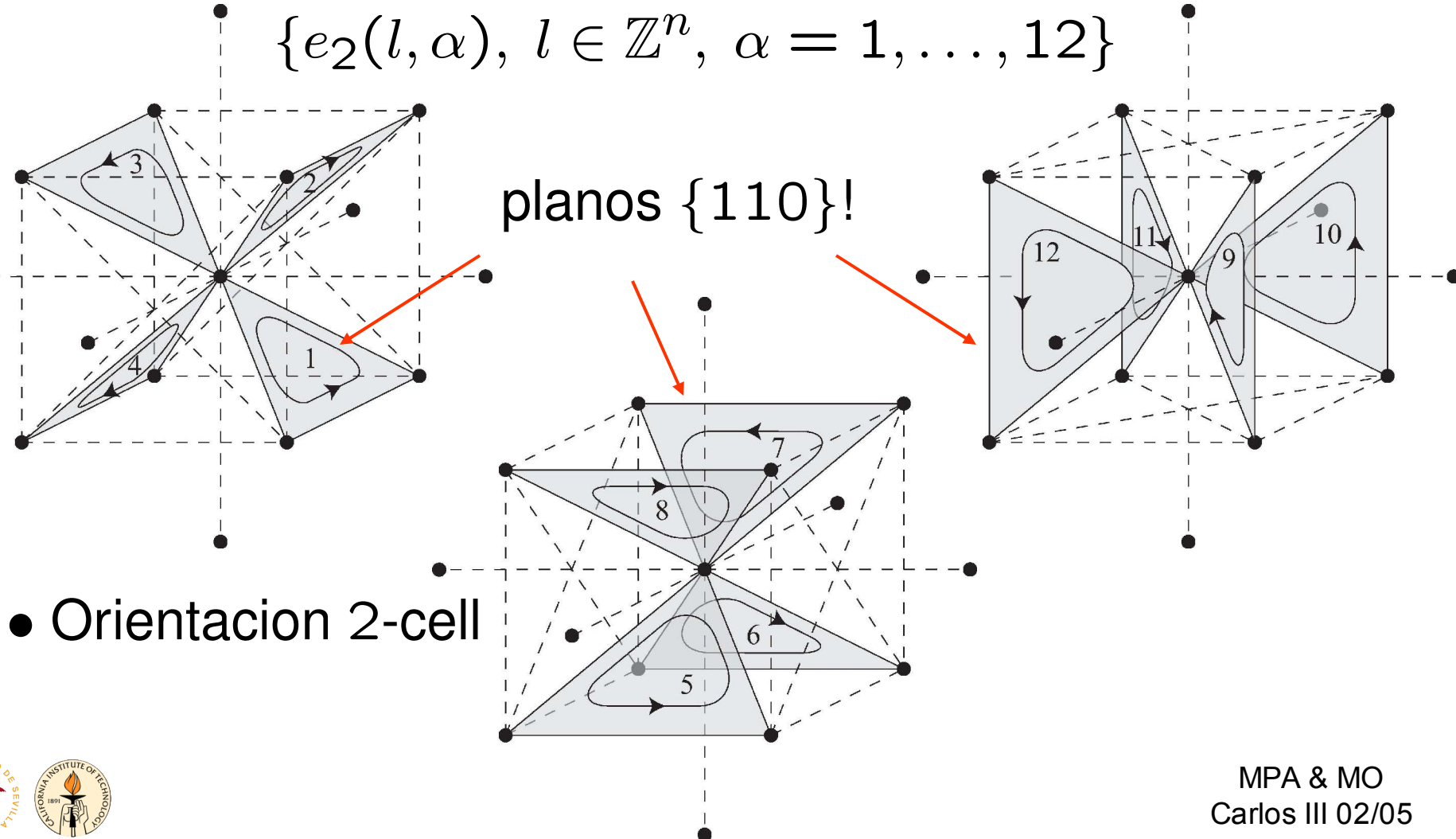
- Numeracion del grupo 1-cell: $E_1 = \{e_1(l, \alpha), l \in \mathbb{Z}^n, \alpha = 1, \dots, 7\}$
- Orientacion 1-cell



Complejo red BCC : 2-cells

- Numeracion del grupo 2-cell: $E_2 = \{e_2(l, \alpha), l \in \mathbb{Z}^n, \alpha = 1, \dots, 12\}$

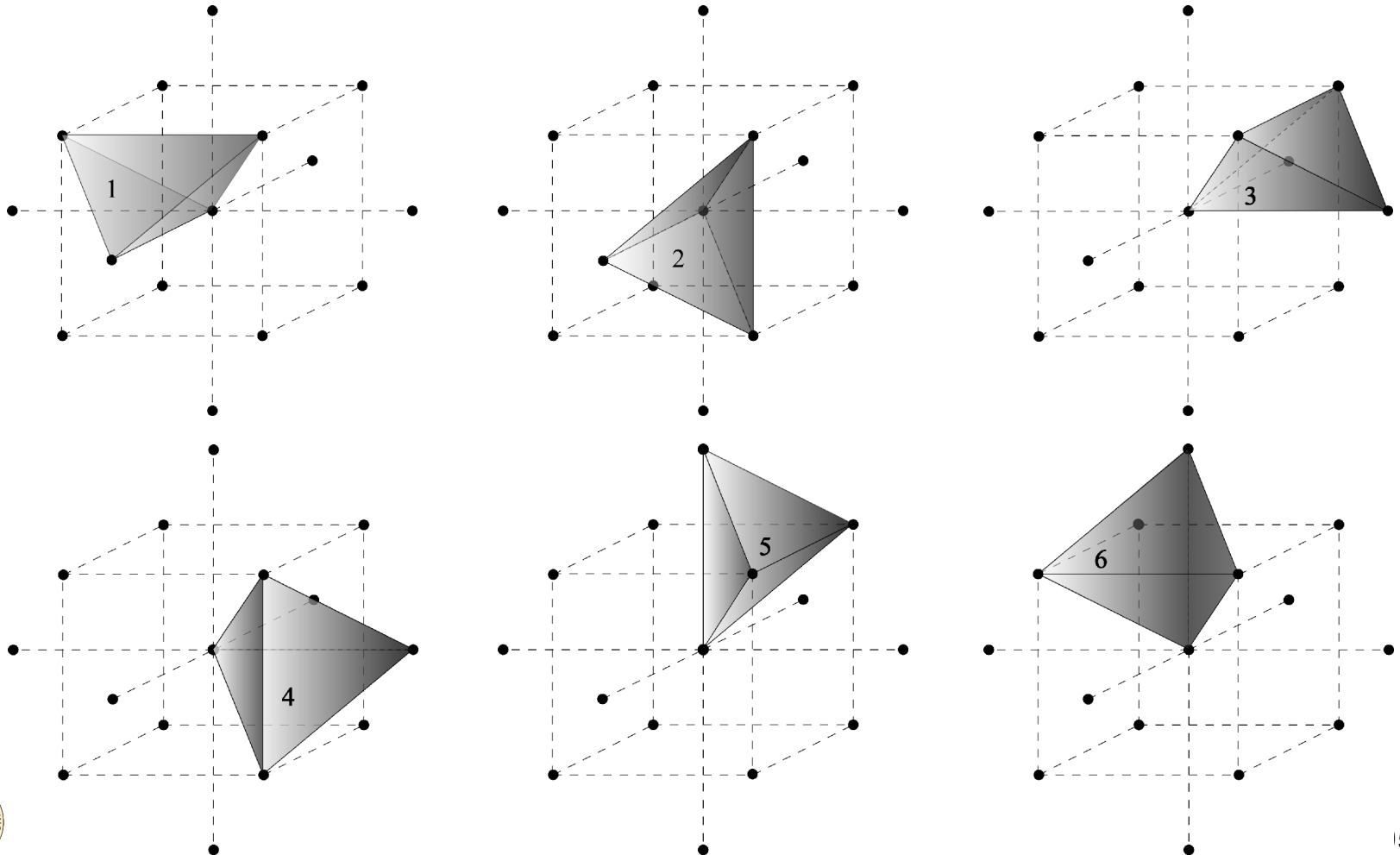
planos $\{110\}$!



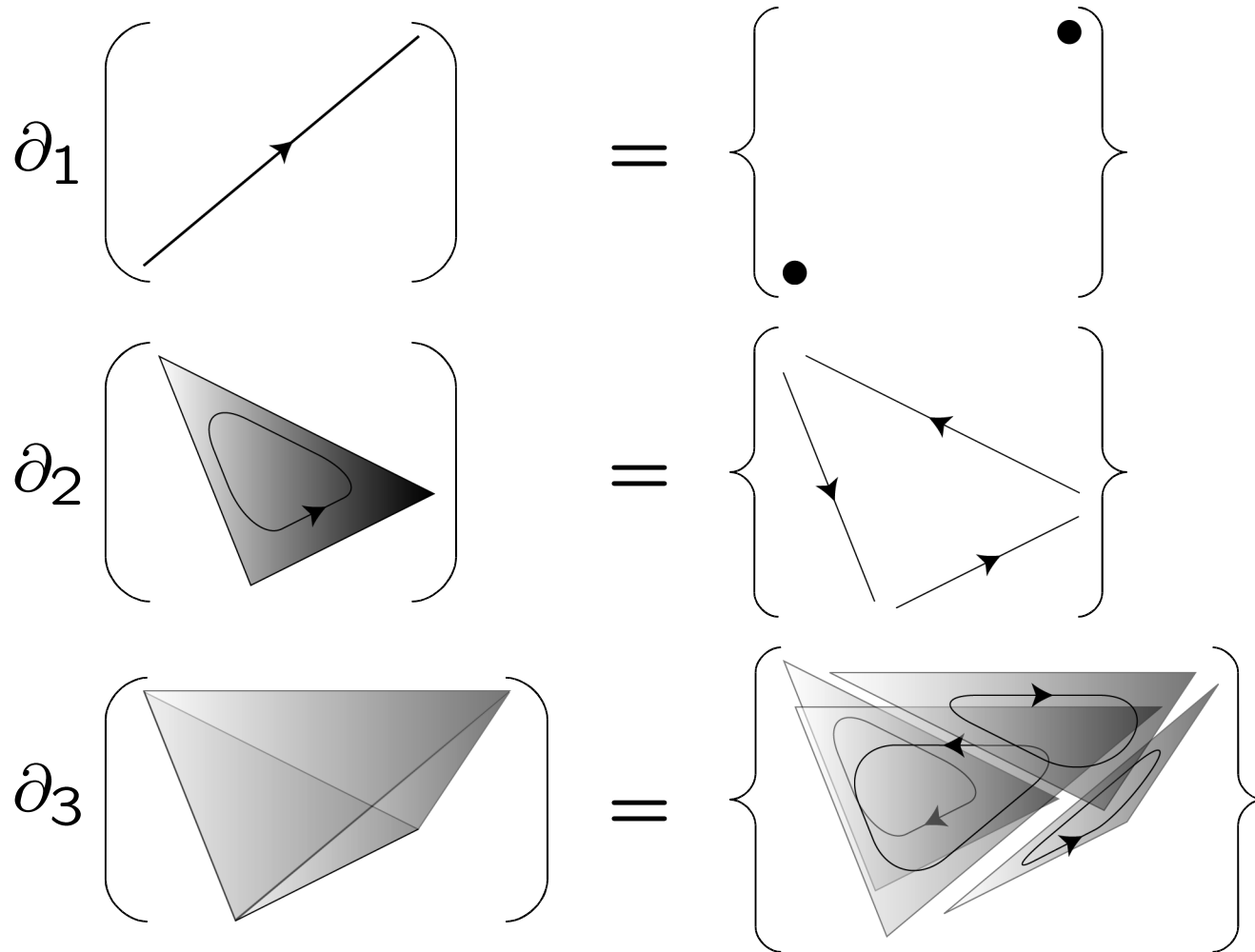
- Orientacion 2-cell

Complejo red BCC : 3-cells

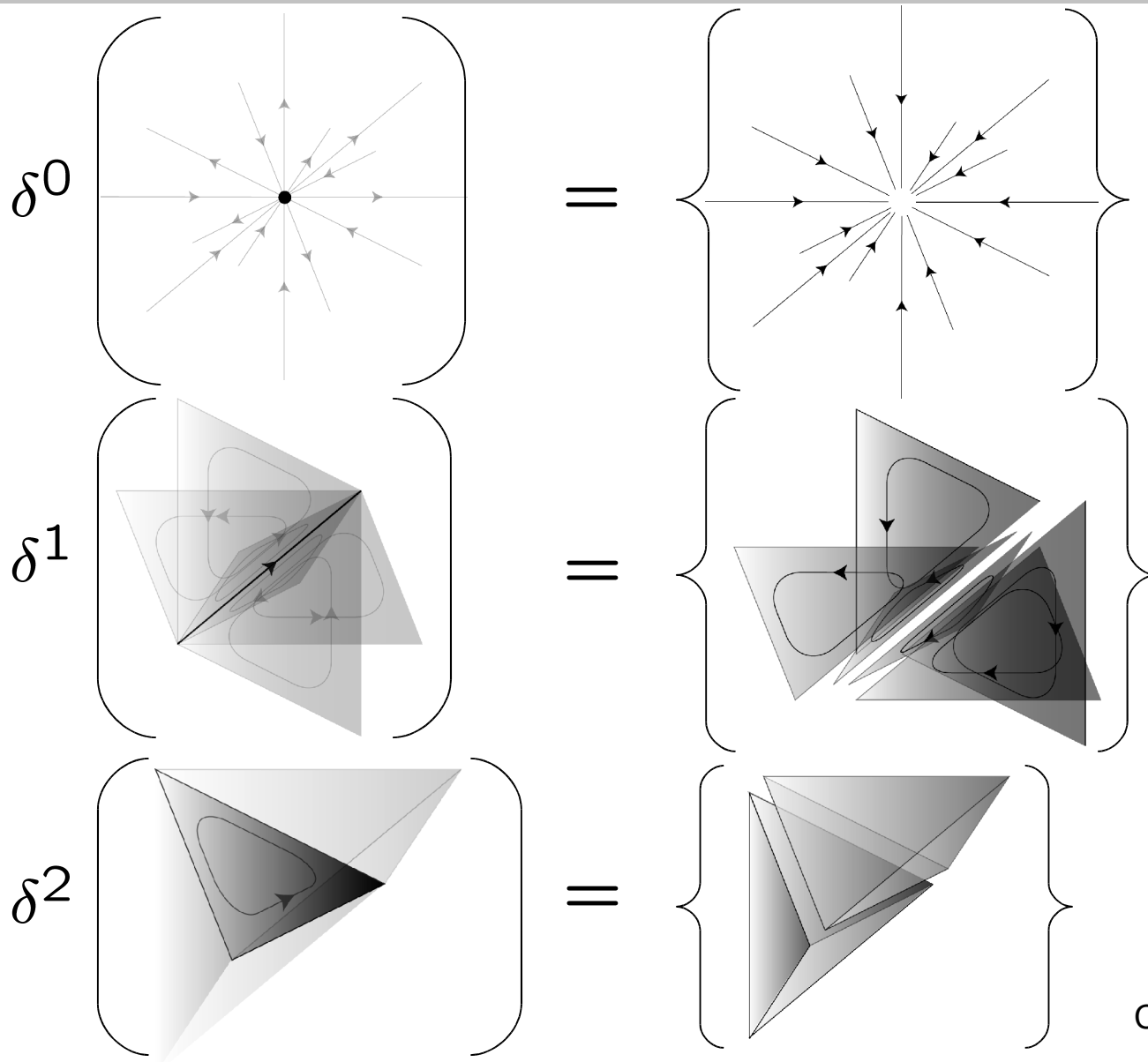
- Numeracion del grupo 3-cell (+ orientacion hacia fuera): $E_3 = \{e_3(l, \alpha), l \in \mathbb{Z}^n, \alpha = 1, \dots, 6\}$



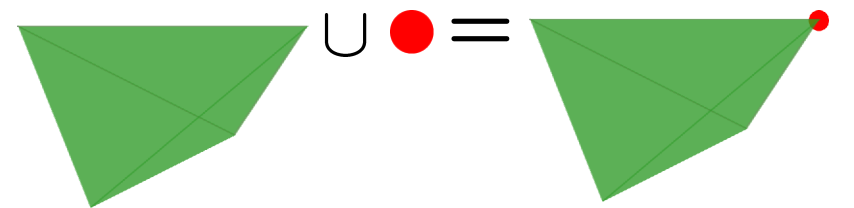
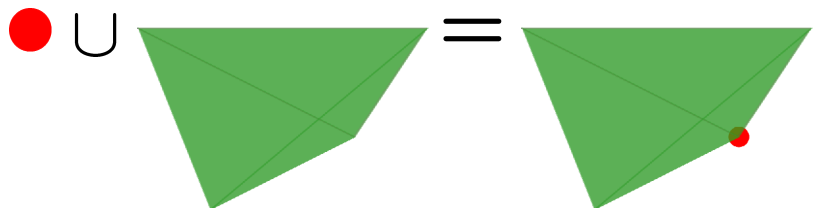
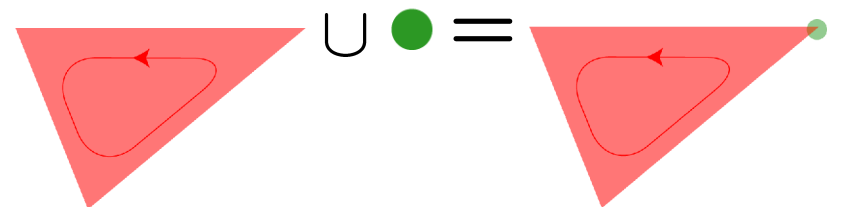
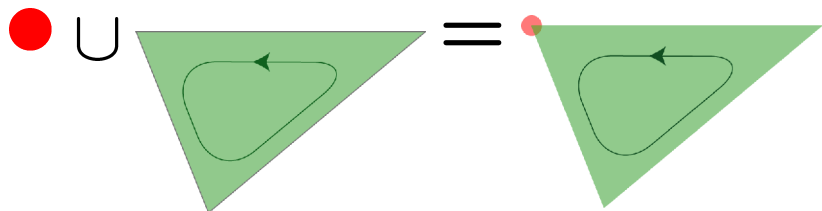
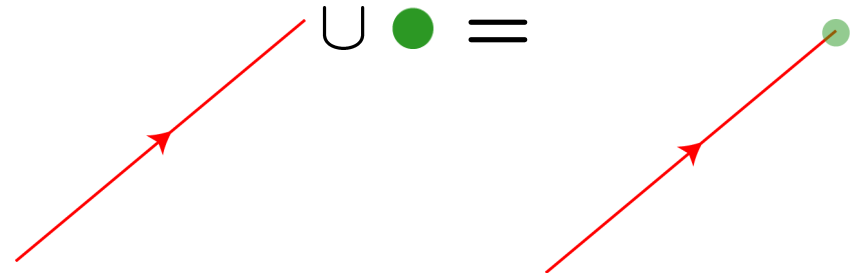
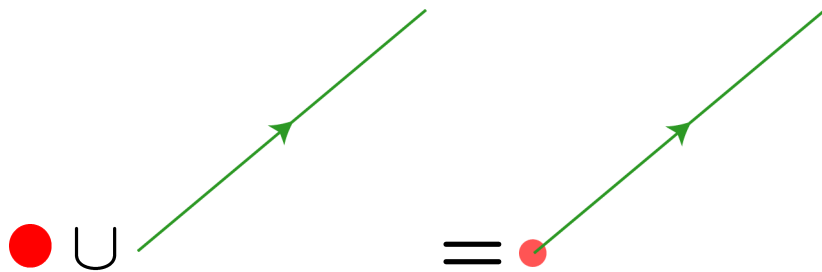
Redes BCC – Operador frontera



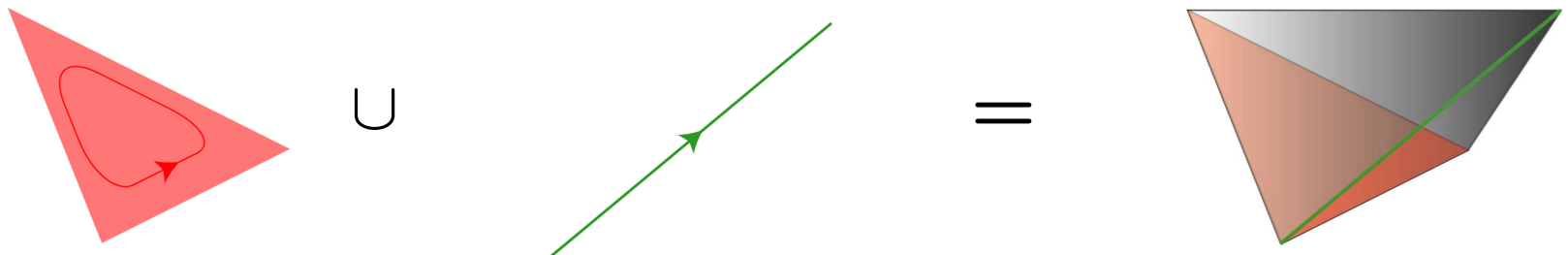
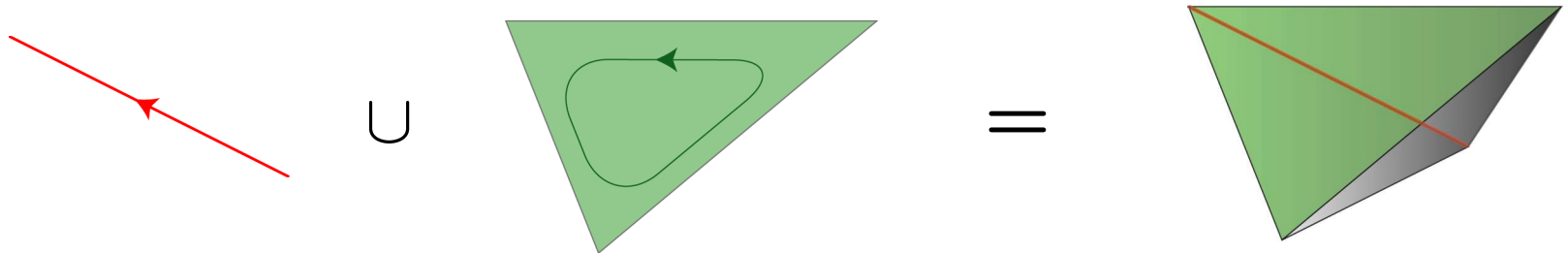
Redes BCC – Operador cofrontera



Redes BCC – Cup product



Redes BCC – Cup product



“

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

■

”

■



Contínuo vs Discreto

- Energia elastica:

$$E = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} c_{ijkl} \beta_{ij}^e \beta_{kl}^e dx$$

- Formula de Kröner (1958):

$$\alpha_{il} = \beta_{ij,k}^p e_{kjl}$$

- Conservacion vector de Burgers:

$$\alpha_{il,l} = 0$$

- Energia elastica:

$$E = \frac{1}{2} \langle C(du - \beta), du - \beta \rangle$$

- Densidad discreta dislocacion:

$$\alpha = d\beta$$

- Conservacion vector de Burgers:

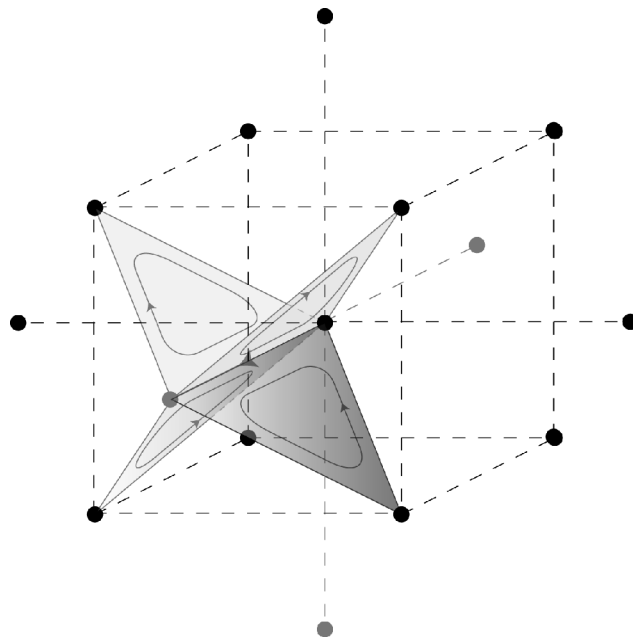
$$d\alpha = 0$$

$\langle \cdot, \cdot \rangle \equiv$ forma cuadratica discreta

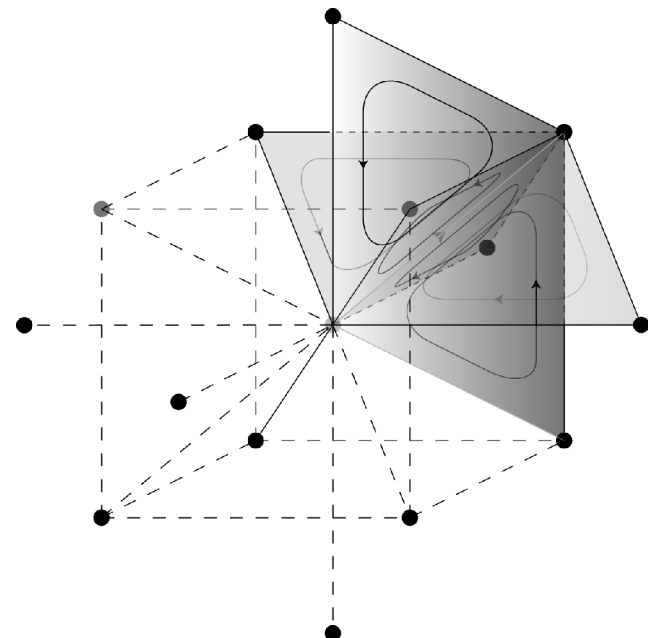
$d \equiv$ operador diferencial discreto

Redes BCC: dislocaciones elementales

- Densidad discreta dislocacion: $\alpha = d\beta$,
 $\beta \equiv$ campo autodeformacion.
- Generadores (basicos) de α :



1-cells Cubicos



1-cells Diagonal

Bucles elementales de dislocación

Límite continuo de la teoría discreta

- La energía lineal-elástica se obtiene como el límite de la energía discreta cuando el parámetro de red a tiende a cero, i. e.,

$$E(u) \sim \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} c_{ijkl} u_{i,j} u_{k,l} dx, \quad a \rightarrow 0$$

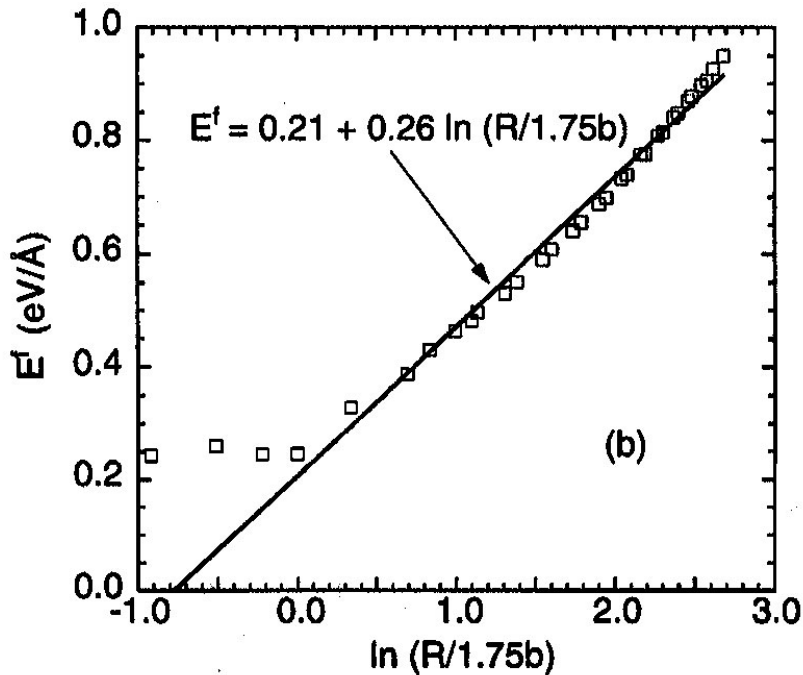
- Para dislocaciones separadas, la energía almacenada presenta variación logarítmica, i. e.,

$$E(\alpha) \sim (\text{prelog factor}) \log \left(\frac{L}{a} \right), \quad L \rightarrow +\infty$$

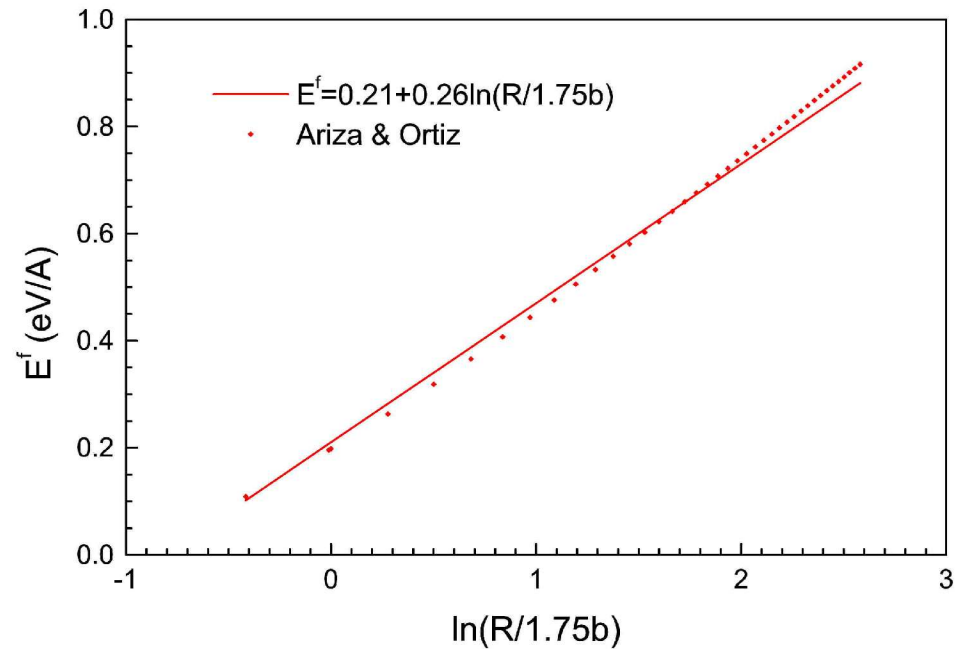
Aplicacion –núcleos dislocación BCC

- La teoría utiliza **autodeformaciones** (invariante cristalográfico cortantes en la red) para introducir defectos en la red (dislocaciones)
- Esta aproximación predice una cierta **estructura del núcleo** de la dislocación, energías del núcleo
- Pregunta: Como de buenas son estas predicciones?
- Estrategia de verificación: Comparar con los cálculos de primeros principios para núcleos de dislocación en cristales BCC

Núcleos dislocación cristales BCC



Yang et al. (*Phil.Mag. A*
81, 2001)



Teoría Discreta

Energía núcleo dislocación, Tantal

Campos de deslizamiento en equilibrio

- Energia elastica:

$$E(u, \beta) = \frac{1}{2} \langle C(du - \beta), du - \beta \rangle$$

- Deslizamiento cristalografico: $\beta_i = \sum_s \xi^s b_i^s$

$\xi^s \equiv$ valor-entero campo de deslizamiento

$b^s \equiv$ vector Burgers

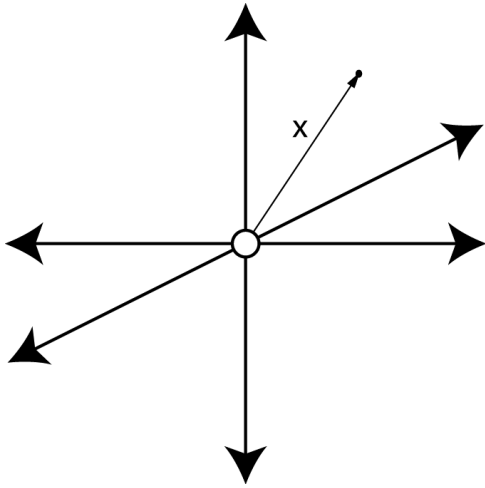
- Energia almacenada: $E(\xi) = \inf_u E(u, \xi)$
- Campos de deslizamiento en equilibrio:

$\inf_{\xi} E(\xi) + \text{terminos fuerzas}$

Aplicación – Punto de dilatación, BCC

- Se considera un cristal BCC que contiene un **punto de dilatación** de fuerza creciente
- Se desea caracterizar los **campos de deslizamiento en equilibrio** y estudiar la estructura de las dislocaciones y su evolución con el incremento de la fuerza en el punto de dilatación
- La solución caracteriza el **campo lejano** de un hueco creciendo
- En un esquema multiescala, la solución proporciona **condiciones de contorno de transición** en estudios atomísticos más detallados

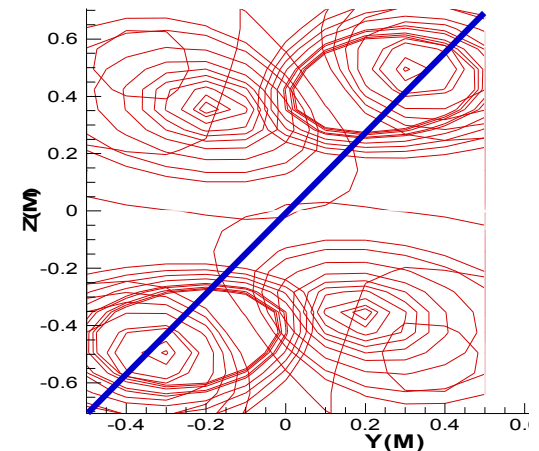
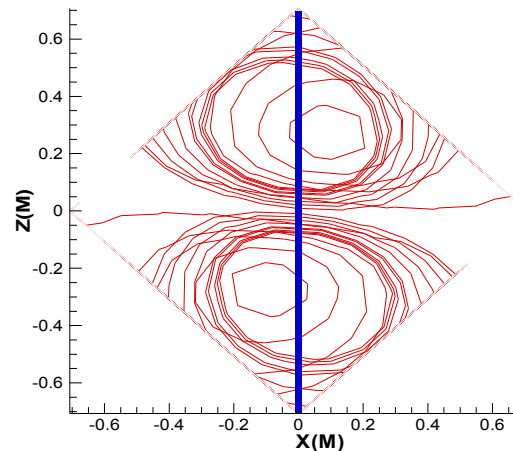
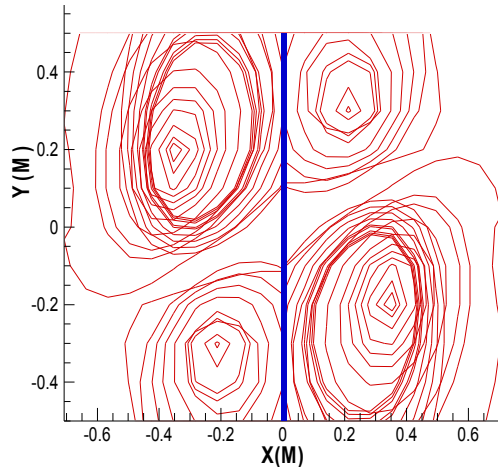
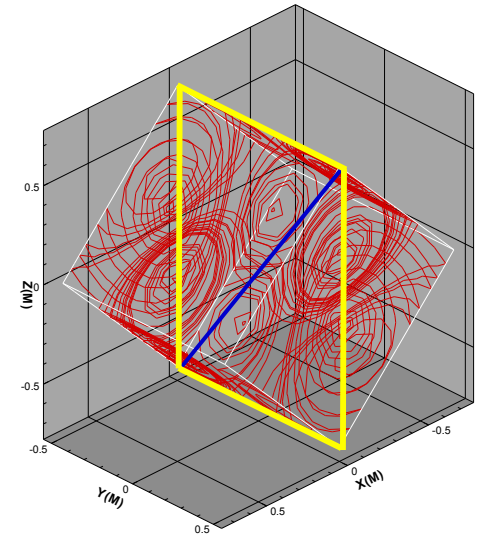
Punto de dilatación



$$u_i(x) = PG_{ij,j}(x)$$

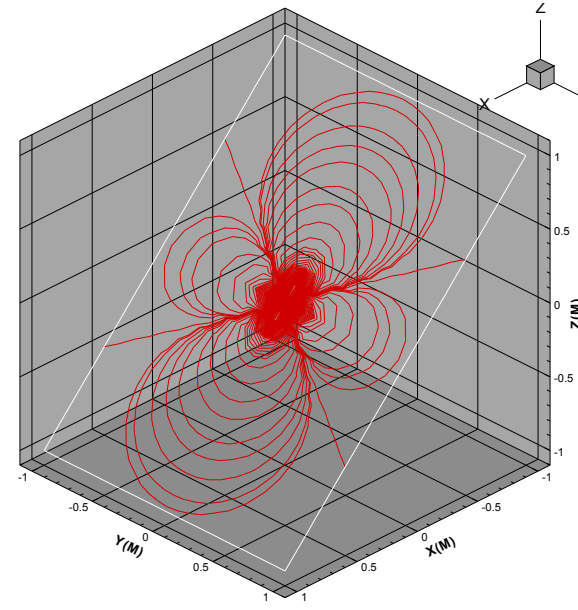
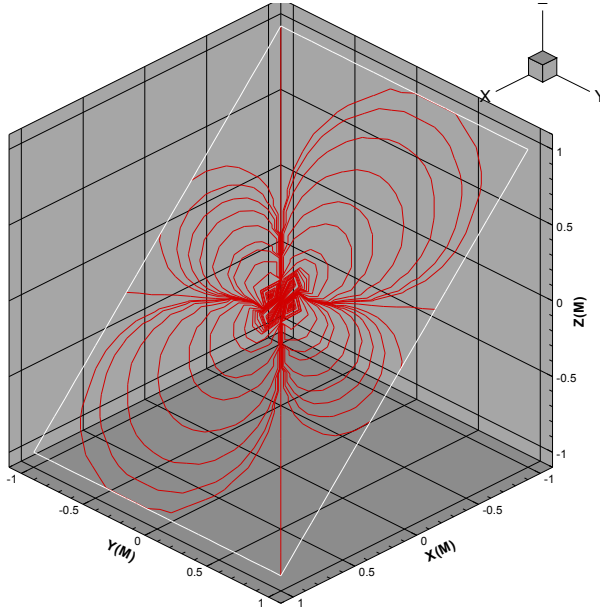
Sistema de deslizamiento A3:

plano $(1 \ 0 \ 1)$
dirección $[-1 \ 1 \ 1]$



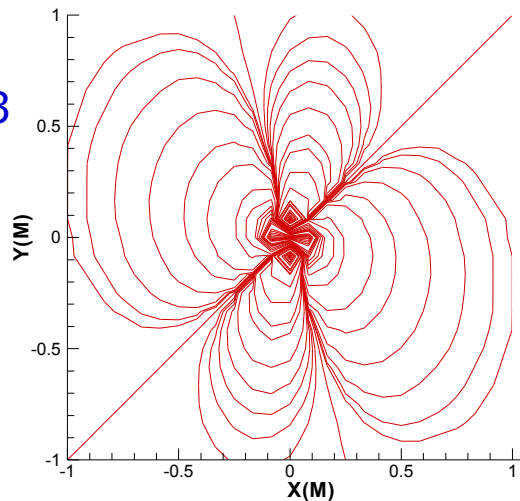
Punto de dilatación

Plano (1 0 1)



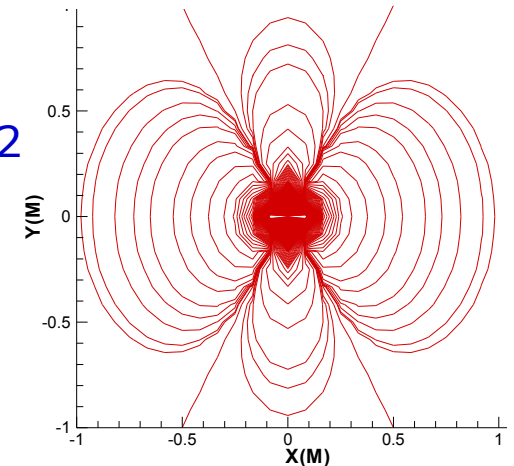
Sistema
deslizamiento A3

plano (1 0 1)
dirección [-1 1 1]



Sistema
deslizamiento A2

plano (0 -1 1)
dirección [-1 1 1]

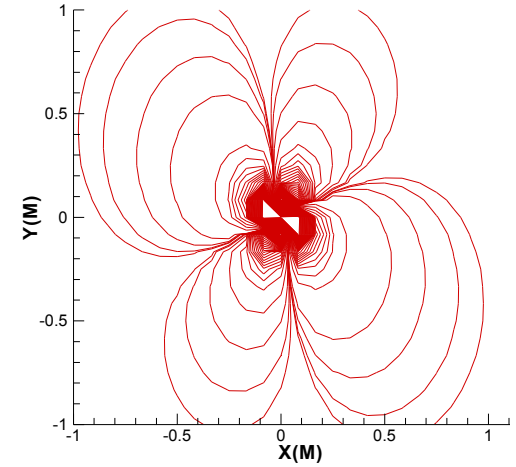
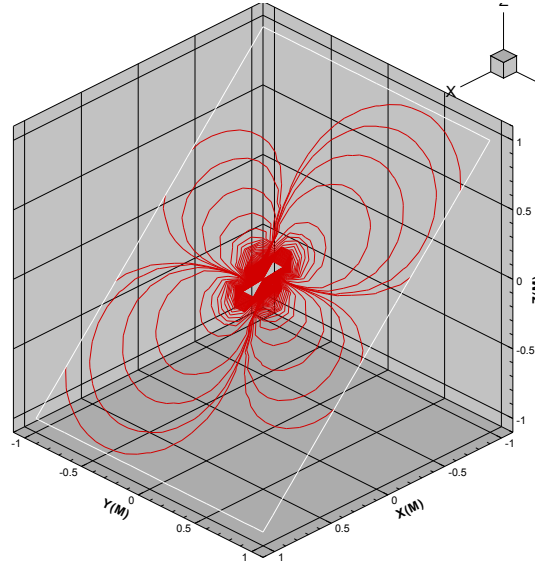


Punto de dilatación

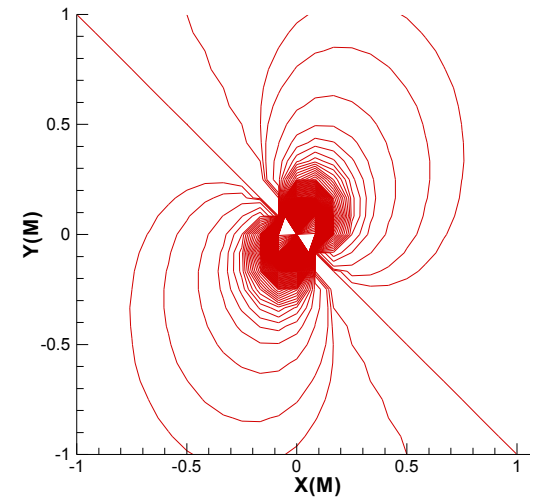
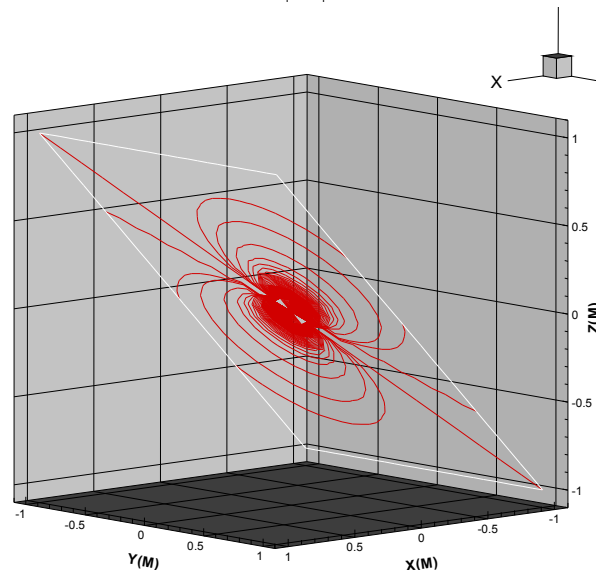
Sistema deslizamiento B4:

plano $(-1\ 0\ 1)$
dirección $[1\ 1\ 1]$

Plano $(1\ 0\ 1)$



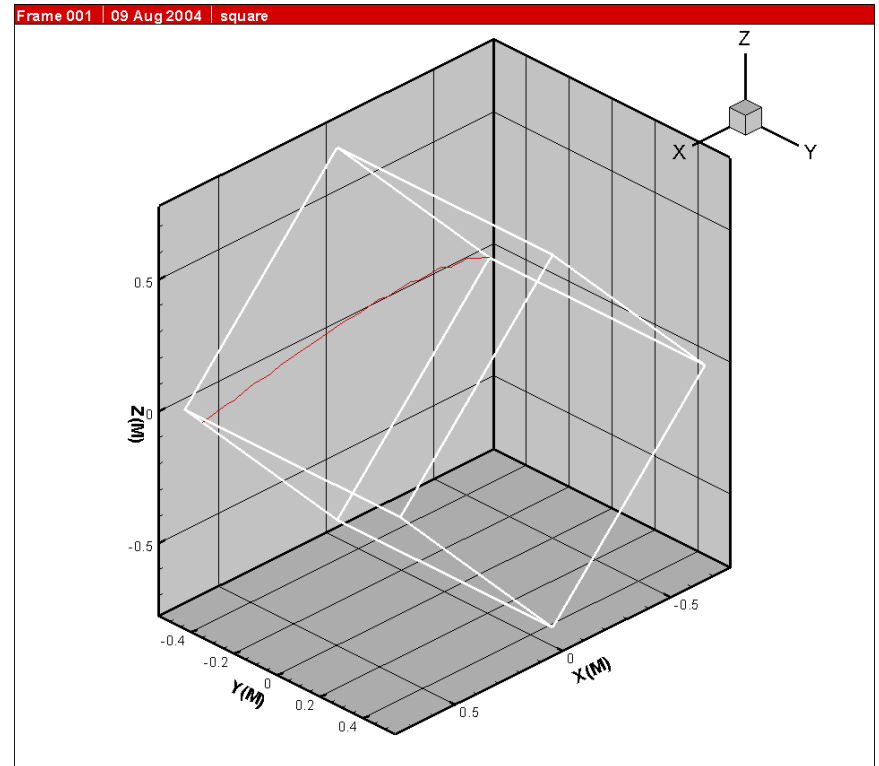
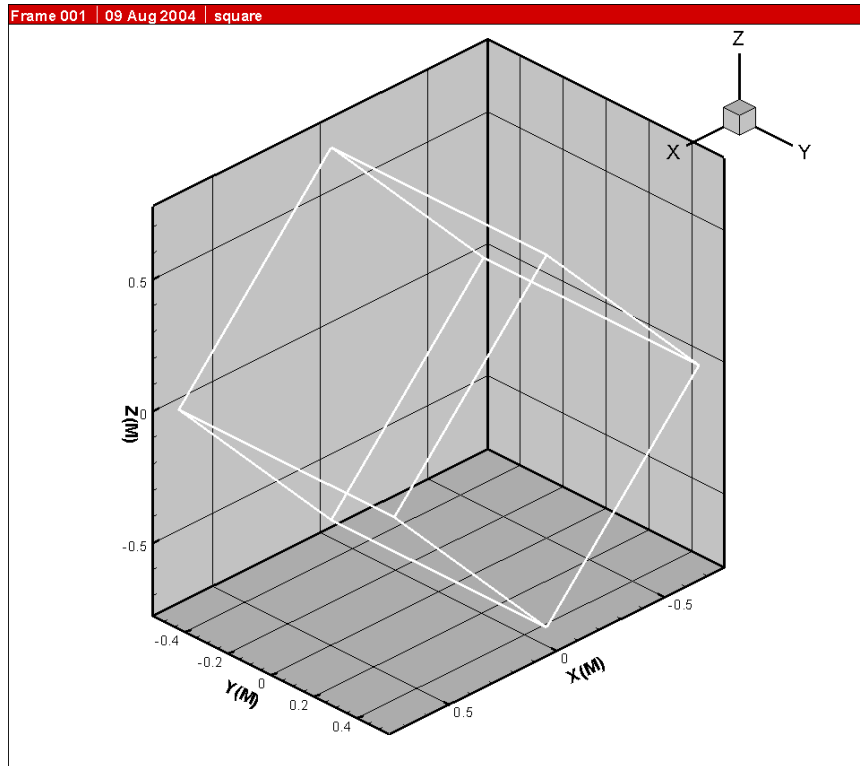
Plano $(-1\ 0\ 1)$



Punto de dilatación

Sistema deslizamiento A3:

plano $(1\ 0\ 1)$
dirección $[-1\ 1\ 1]$



Plano $(1\ 0\ 1)$

Plano $(0\ 1\ 0)$

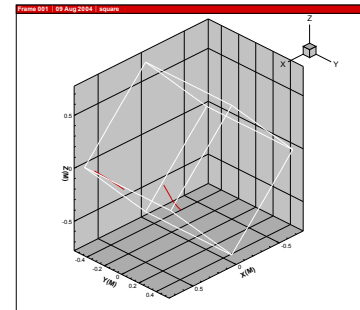
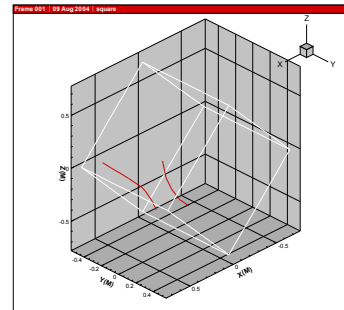
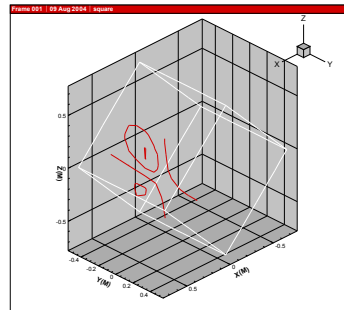
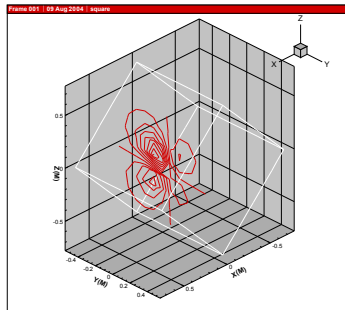
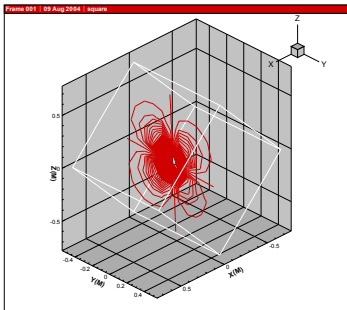
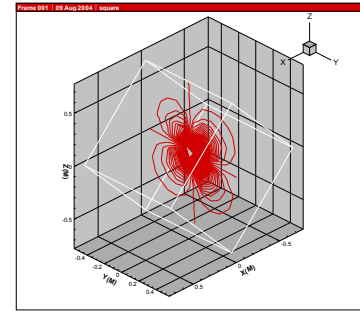
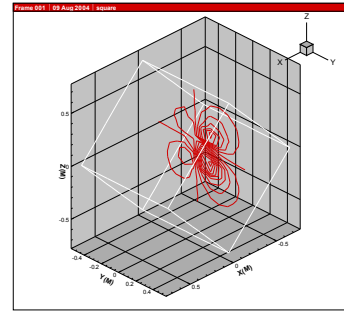
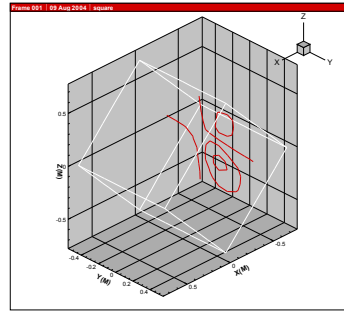
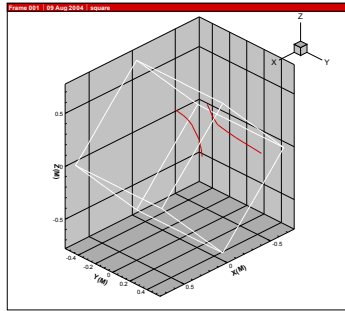
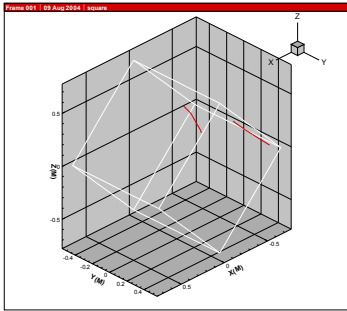
MPA & MO
Carlos III 02/05

Punto de dilatación

Sistema deslizamiento A3:

plano $(1\ 0\ 1)$
dirección $[-1\ 1\ 1]$

Plano $(1\ 0\ 1)$

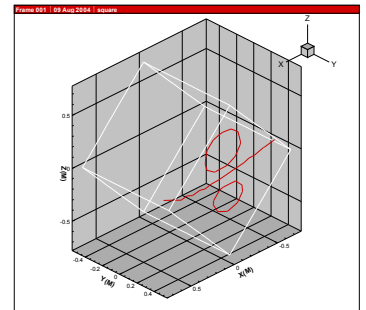
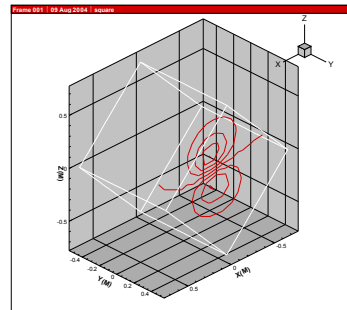
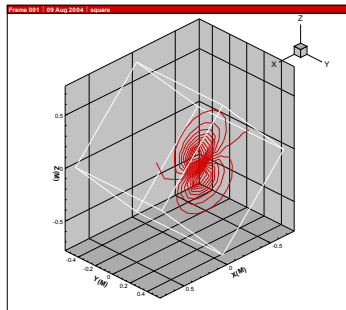
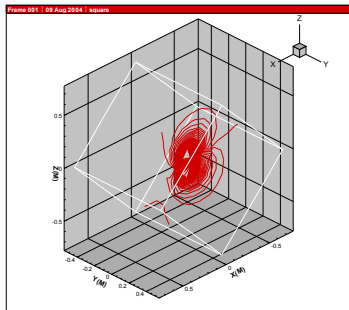
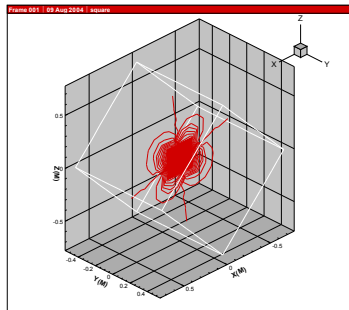
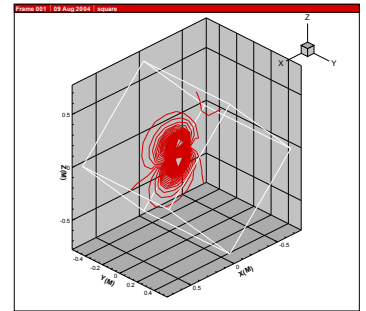
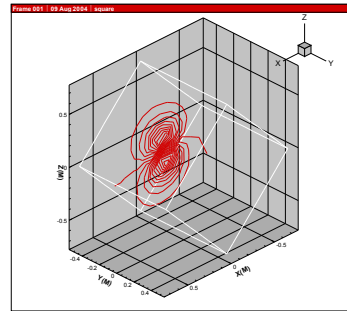
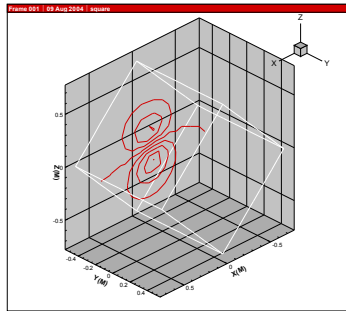
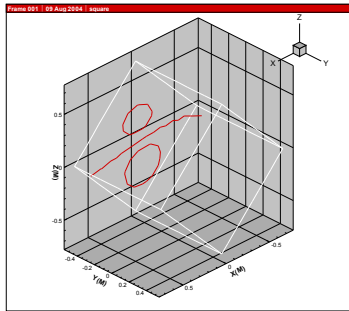
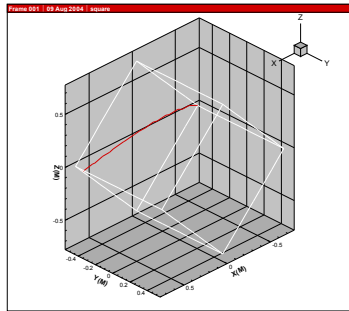


Punto de dilatación

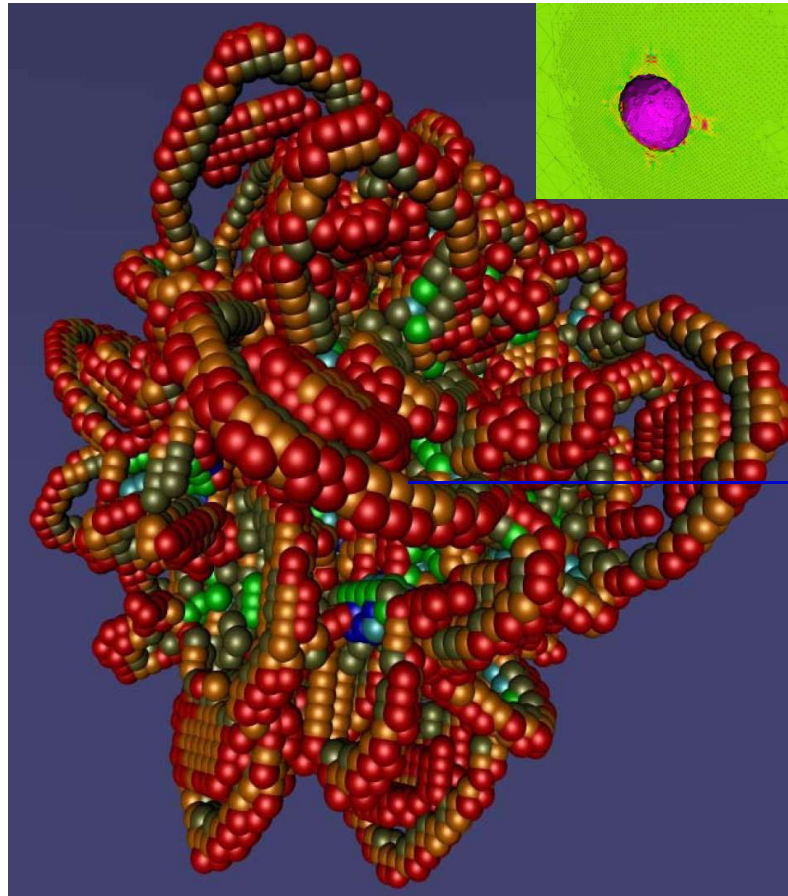
Sistema deslizamiento A3:

plano $(1\ 0\ 1)$
dirección $[-1\ 1\ 1]$

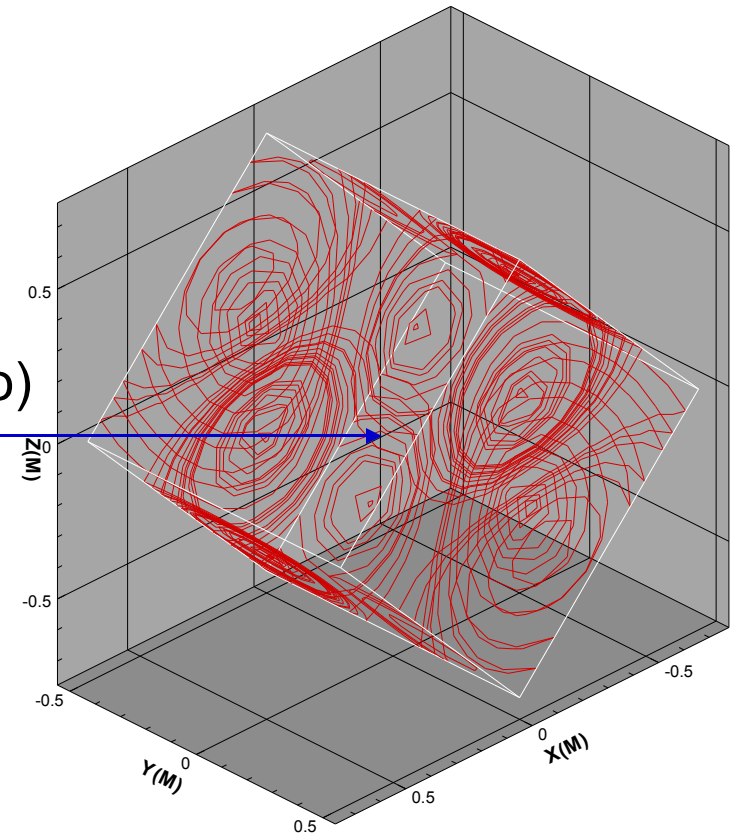
Plano $(0\ 1\ 0)$



Nanohuecos en Al - Multiescala



(dentro)



Resultados cuasi-continuos
cavitación nanohuecos en Al
(Marian, Knap and Ortiz, 2004)

Teoría discreta proporciona
CCs 'transición'

Conclusiones (I)

- Desarrollo una teoría discreta para cristales y dislocaciones en cristales
- Permite tratamiento de redes cristalinas como complejos CW y proporciona operadores diferenciales e integrales discretos, teorema de Stokes
- La teoría aporta analogías discretas de:
 - *El tensor de densidad de dislocación*
 - *La ecuación de conservación del vector de Burgers*
 - *Relación de Kröner...*
- La teoría tiene límites continuos:
 - *Elasticidad lineal (cristales sin dislocaciones)*
 - *Un factor prelogarítmico para conjuntos de dislocaciones arbitrario*

Conclusiones (II)

- Las energías discretas calculadas para núcleos de dislocaciones presentan buen acuerdo con cálculos de primeros principios en cristales BCC
- Campos de deslizamiento 3D y distribución de dislocaciones para un punto de dilatación en un cristal BCC
- La teoría discreta conecta de forma natural los modelos atomísticos y la elasticidad lineal

Una teoría discreta de dislocaciones en redes cristalinas

M.P. Ariza y M. Ortiz

Universidad de Sevilla

California Institute of Technology



MPA & MO
Carlos III 02/05