

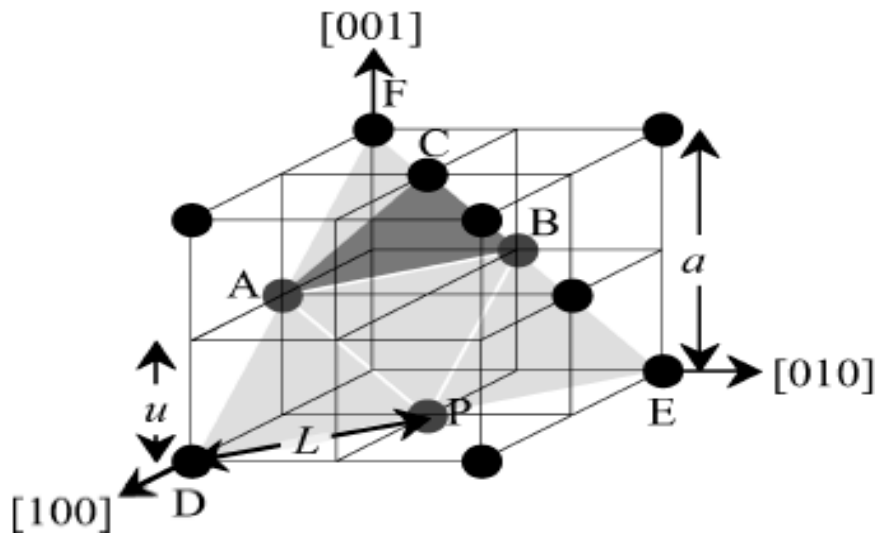
Modelo Autómata Celular Tridimensional para el Movimiento de Dislocaciones en Cristales FCC

SERGIO COURTIN V.
RODRIGO MADRID G.

El método del CA requiere la discretización espacial del material en una rejilla tridimensional de parches, donde cada uno es capaz de deslizar. Se utiliza una geometría triangular en los parches, que refleja la simetría de una estructura FCC.

Desarrollo del Modelo: Discretización

- Celda unitaria de arista “a”, se subdivide en 8 celdas, cada una de lado “u”, por lo tanto $u=a/2$
- El plano denso de la familia $\{111\}$, se subdivide en 4 triángulos equiláteros, cada uno de lado $L=\sqrt{2}u$
- Cada uno de estos 4 triángulos corresponden al área por un átomo de la celda



Energética de Deslizamiento

El deslizamiento de parches individuales cambia la energía de un cristal tensionado por una cantidad:

$$\Delta\Phi = \Delta e - \Delta w$$

Donde:

Δe : Energía elástica, dependiente de las interacciones entre los segmentos.

Δw : Trabajo realizado por las fuerzas aplicadas e internas de la tensión, que depende de la tensión aplicada $\sigma(a)$ y microestructural $\sigma(m)$.

Evolución del sistema

Para la actualización de la dislocación en función del tiempo, se necesita saber la probabilidad de que un parche deslice durante un intervalo Δt , en nuestro caso esta probabilidad es:

$$P_k(\Delta t) = \eta \Delta t \cdot \text{EXP}(-\Delta \Phi_k / kT)$$

Donde:

η : Frecuencia tentativa.

T: Temperatura.

K: Constante de Boltzmann.

Se calcula el cambio en la energía del sistema, ΔE :

- Si $\Delta E < 0$, se produce movimiento, y el sistema se encuentra en un nuevo estado de menor energía
- Si $\Delta E > 0$ se da el movimiento con la probabilidad P_k y se toma un número al azar (ϵ) entre 0 y 1.

Si $\epsilon < P_k$ el sistema se mueve a un nuevo estado.

Si $\epsilon > P_k$ el sistema se devuelve a su antiguo estado

Conclusiones

Los casos analizados fueron:

- Nucleación de un parche triangular en un segmento finito
- La simulación de Frank-Read en un medio infinito elástico isotrópico y anisotrópico
- La simulación del cruce-deslizamiento durante la operación Frank-Read

Comparando los resultados analíticos y los del CA, los casos demostraron concordancia.