

Simulación del movimiento de átomos de Cr en sistemas Fe-Cr

I. San Sebastian¹, J.Aldazabal, C. Capdevila², C. Garcia-Mateo²

¹CEIT y Tecnun (Universidad de Navarra), Paseo Manuel de Lardizábal 15,
20018 San Sebastian, España.

²MATERIALIA Research Group. Department of Physical Metallurgy, Centro Nacional de
Investigaciones Metalúrgicas (CENIM_CSIC), Avd. Gregorio del Amo 8, E-28040 Madrid,
España.

jaldazabal@ceit.es

Desde un punto de vista macroscópico, se asume que la composición química dentro de un material es homogénea, pero si se examina más profundamente se aprecia que la composición del material no se mantiene tan constante. Los átomos saltan aleatoriamente en la red cristalina debido a su energía térmica. Estos saltos aleatorios hacen que se formen esporádicamente en el cristal zonas con mayor concentración de algunos elementos, éstos son responsables de muchos fenómenos tales como, la descomposición espinodal, la segregación, la precipitación, Ostwald ripening... El modelo presentado en este trabajo simula la difusión del Cr en Fe en un sistema Fe-Cr a nivel atómico. Las temperaturas simuladas están en el rango entre 650-750 K, ya que de acuerdo con el diagrama de fases Fe-Cr es en este intervalo donde tiene lugar la descomposición espinodal.

El modelo 3D desarrollado, que tiene en cuenta los saltos sustitucionales en la red cristalina, se ha aplicado para simular la evolución en la composición de un frente plano en un dominio prismático. Dicho dominio se ha dividido en pequeños prismas para procesarlo en un cluster de ordenadores. El cluster utilizado tiene 24 procesadores Pentium IV de 2.6GHz, y se ha empleado alrededor de 13 GB de memoria RAM.

Los resultados predichos por el modelo se han aplicado para estudiar la relación entre la frecuencia de saltos atómicos y el coeficiente de difusión macroscópico. La validación de dichas predicciones se ha llevado a cabo usando el software DictraTM. También se han realizado diferentes simulaciones a diferentes temperaturas con objetivo de estudiar la relación de la frecuencia de saltos y la temperatura. Estos resultados se han ajustado a una ecuación de tipo Arrhenius, de modo que se pueda determinar la energía de activación de los saltos de átomos de Cr. Comparando el valor obtenido en las simulaciones realizadas, 306 kJ/mol, con el valor empírico de la difusión del Cr en Fe-bcc, 250 kJ/mol, se puede decir que los resultados del modelo son aceptables.

Dichos resultados obtenidos serán muy útiles para estudiar fenómenos a escala atómica, como la segregación del Cr en la aleación de Fe, o la descomposición espinodal que se da en este material a bajas temperaturas.

[1] J. Aldazabal, C. Garcia-Mateo, Mater. Sci. Forum 500-501, 719-729 (2005).

[2] M. Creel, [http://idea.uab.es/mecreel/ParallelKnoppix\(Online](http://idea.uab.es/mecreel/ParallelKnoppix(Online) March 2007).

[3] Dictra User's guide (Dept. of Materials Science and Engineering) Royal Institute of Technology, Sweden 63-71, 1998

[4] A.W. Bowen, G.M. Leak, Metall. Trans. 1, 1695-1700 (1970).

Palabras Clave: Random walk, difusión, Cr-Fe, bcc.