



INTERACCIÓN DE DEFECTOS PUNTUALES CON SUPERFICIES LIBRES

María Inés Pascuet

RESUMEN

En las redes hexagonales del Ti- α y el Zr- α se estudió la microestructura de superficies libres con orientaciones (0001), ($\bar{1}210$) y ($10\bar{1}0$), así como sus interacciones con vacancias y adátomos. Para ello se emplearon técnicas atomísticas y potenciales interatómicos de muchos cuerpos. Mediante estática molecular se calcularon las energías y entropías vibracionales de formación y migración de defectos puntuales, así como las respectivas frecuencias de salto, a fin de evaluar factores de correlación y coeficientes de difusión asociados a cada mecanismo. También se estudió la estructura y energética de escalones en dichas superficies y se analizó la formación de muescas causadas por vacancias o adátomos. Finalmente se aplicó dinámica molecular, a fin de analizar tanto la estabilidad de las superficies como los mecanismos de migración de defectos puntuales, en función de la temperatura.

POINT DEFECTS INTERACTION WITH FREE SURFACES

María Inés Pascuet

ABSTRACT

The free surface microstructure with orientations (0001), ($\bar{1}210$) and ($10\bar{1}0$) and their interactions with vacancies and adatoms have been studied in the hexagonal lattices of α -Ti and α -Zr. Atomistic techniques and many body interatomic potentials have been applied to this end. Molecular statics has been employed to calculate point defects formation and migration energies, vibrational entropies, and jump frequencies, in order to evaluate the correlation factors and diffusion coefficients associated to each mechanism. The structure and energetics of steps on the above surfaces and the formation of kinks on the steps have also been studied. Finally, the stability of the surfaces and the point defects migration mechanisms at different temperatures have been analyzed using molecular dynamics.