

Transformaciones martensíticas con un potencial isotrópico de dos cuerpos

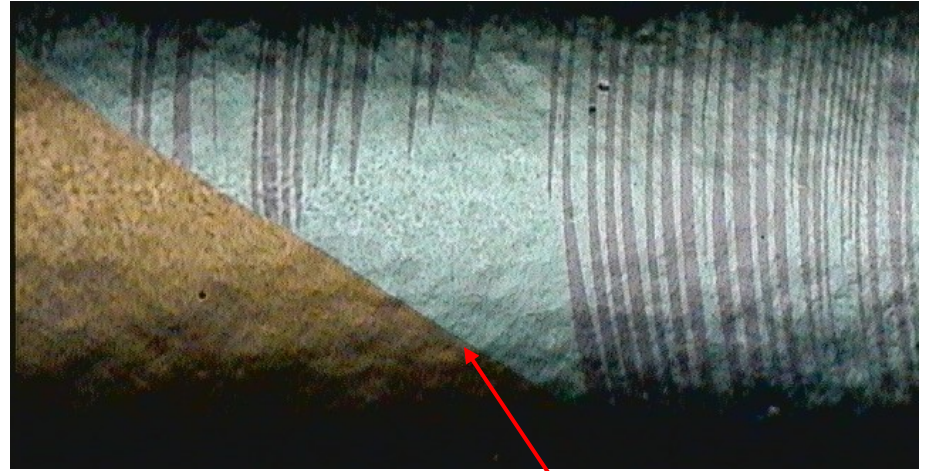
Fabiana Laguna, Eduardo Jagla

Centro Atómico Bariloche, Bariloche, Argentina

lagunaf@cab.cnea.gov.ar

Transformaciones martensíticas

- Transformaciones de fase sólido (austenita) - sólido (martensita)
- De primer orden
- Mecanismo de nucleación y crecimiento de placas
- No difusiva: La martensita hereda el orden configuracional de la austenita.



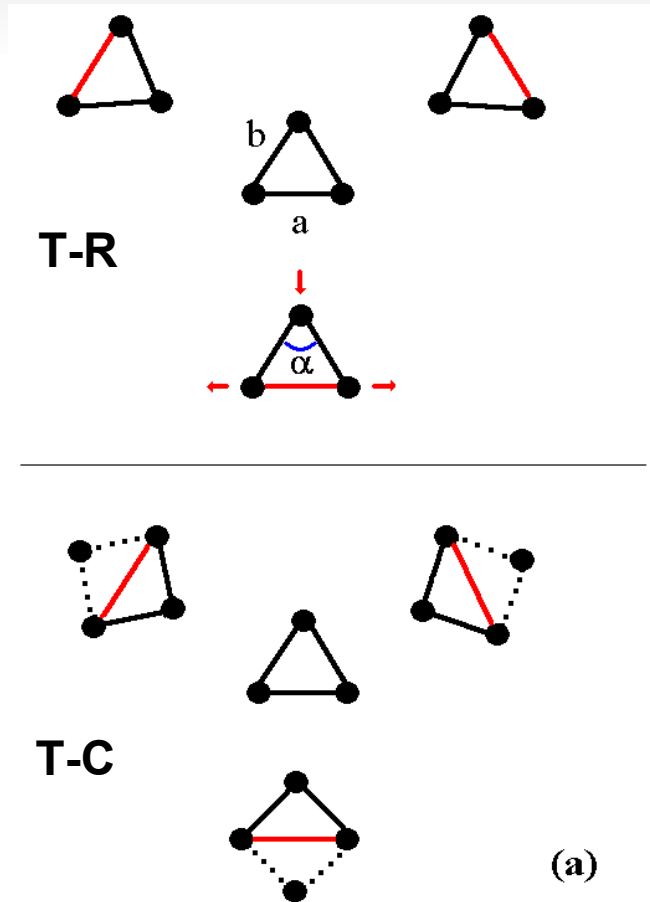
Plano de hábito



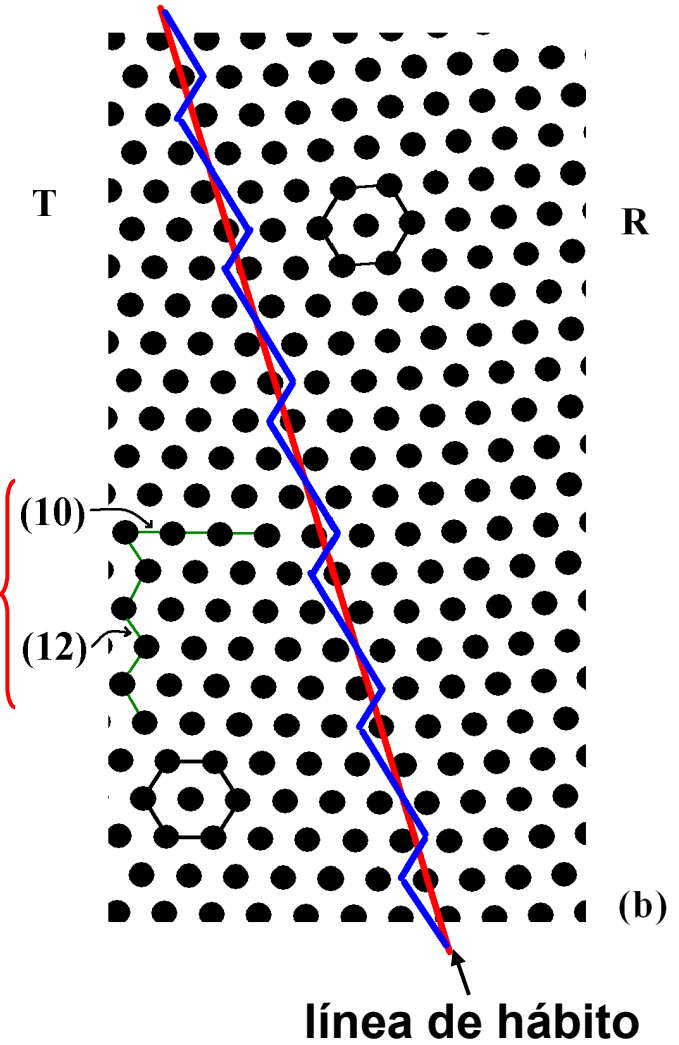
Reversibilidad

Efecto memoria de forma, Superelasticidad

Transformaciones martensíticas en 2D



Dos tipos
de
superficie



Austenita = Estructura triangular (T)
Martensita = Romboédrica (R)
Cuadrada (C)

Dos comportamientos diferentes:
T-R reversible T-C irreversible

La posibilidad de encontrar una transformación martensítica en un sistema dado, se asocia usualmente a la existencia de partículas de diferente tipo interactuando a través de un potencial complejo.

Pero algunos potenciales simples para partículas idénticas pueden estabilizar múltiples estructuras cristalinas.

En muchos casos este comportamiento se obtiene variando levemente el potencial de Lennard-Jones, que da lugar a estados fundamentales compactos.

En esta línea, diseñamos un potencial de dos cuerpos esféricamente simétrico que produce diferentes configuraciones cristalinas al variar un parámetro.

Esta variación genera un cambio relativo de estabilidad de las configuraciones y esto puede dar lugar a una transformación martensítica en el sistema.

Potencial isotrópico de dos cuerpos

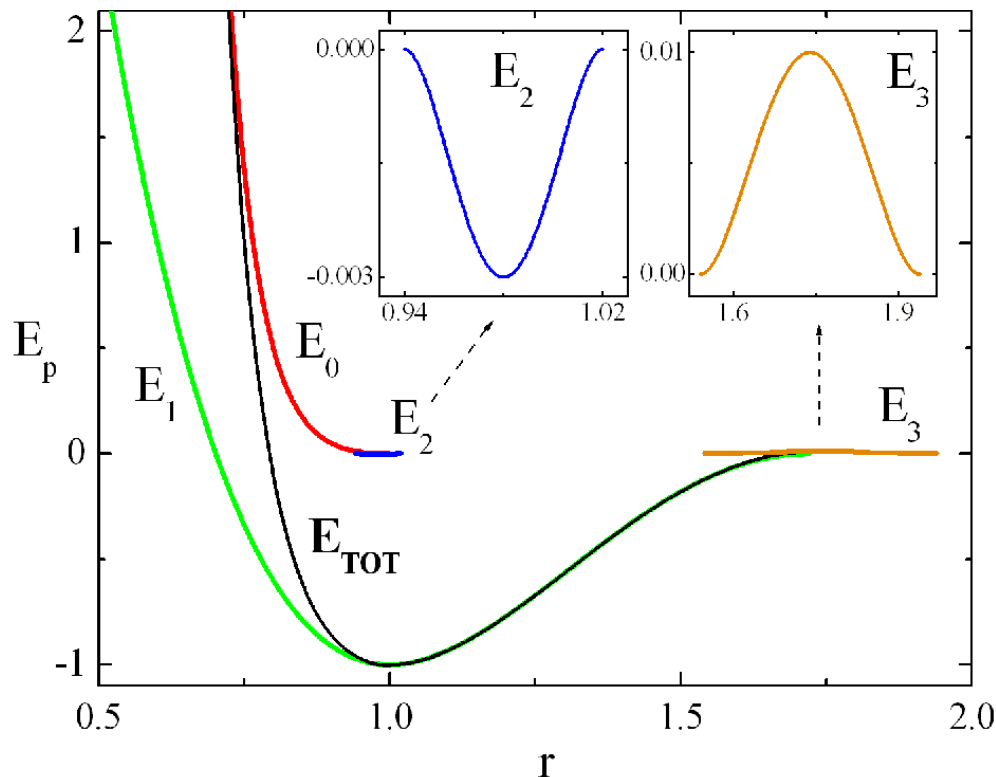
$$V(r) = V_0(r) + V_1(r) + V_2(r) + V_3(r), \quad \text{donde:}$$

$$V_0(r) = A_0 [1/r^{12} - 2/r^6 + 1] \quad \text{si } r < 1$$

$$V_1(r) = [(r-1)^2(r+1-2c)^2 / (c-1)^4] - 1 \quad \text{si } r < c \quad (0 \text{ en c.o.c.})$$

$$V_2(r) = -A_2 [(r-d_2-s_2)^2 (r-d_2+s_2)^2] / s_2^4 \quad \text{si } d_2-s_2 < r < d_2+s_2$$

$$V_3(r) = A_3 [(r-d_3-s_3)^2 (r-d_3+s_3)^2] / s_3^4 \quad \text{si } d_3-s_3 < r < d_3+s_3$$



$$P = \{A_0, c, A_1, d_1, s_1, A_2, d_2, s_2\}$$

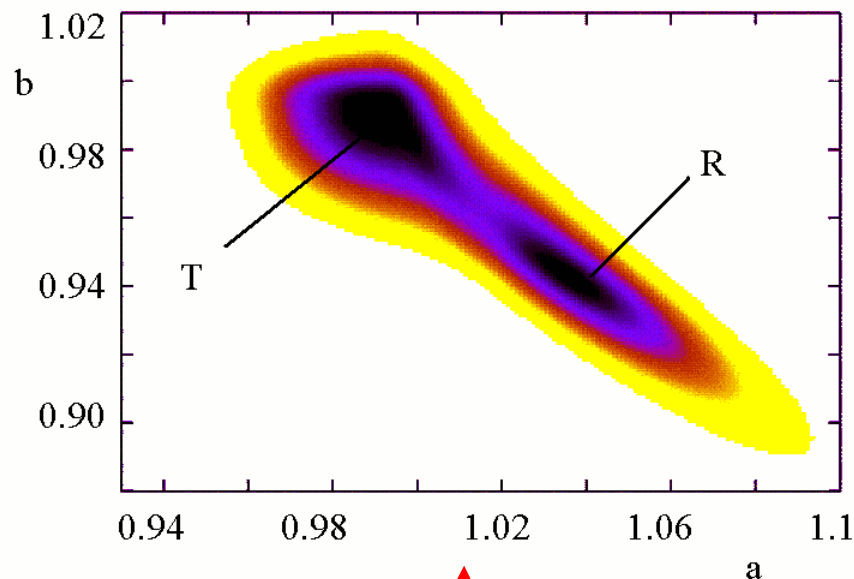
Determina la forma de $V(r)$

Encontramos dos conjuntos:

$$P_1 = f(A_0) \quad \text{para T-R}$$

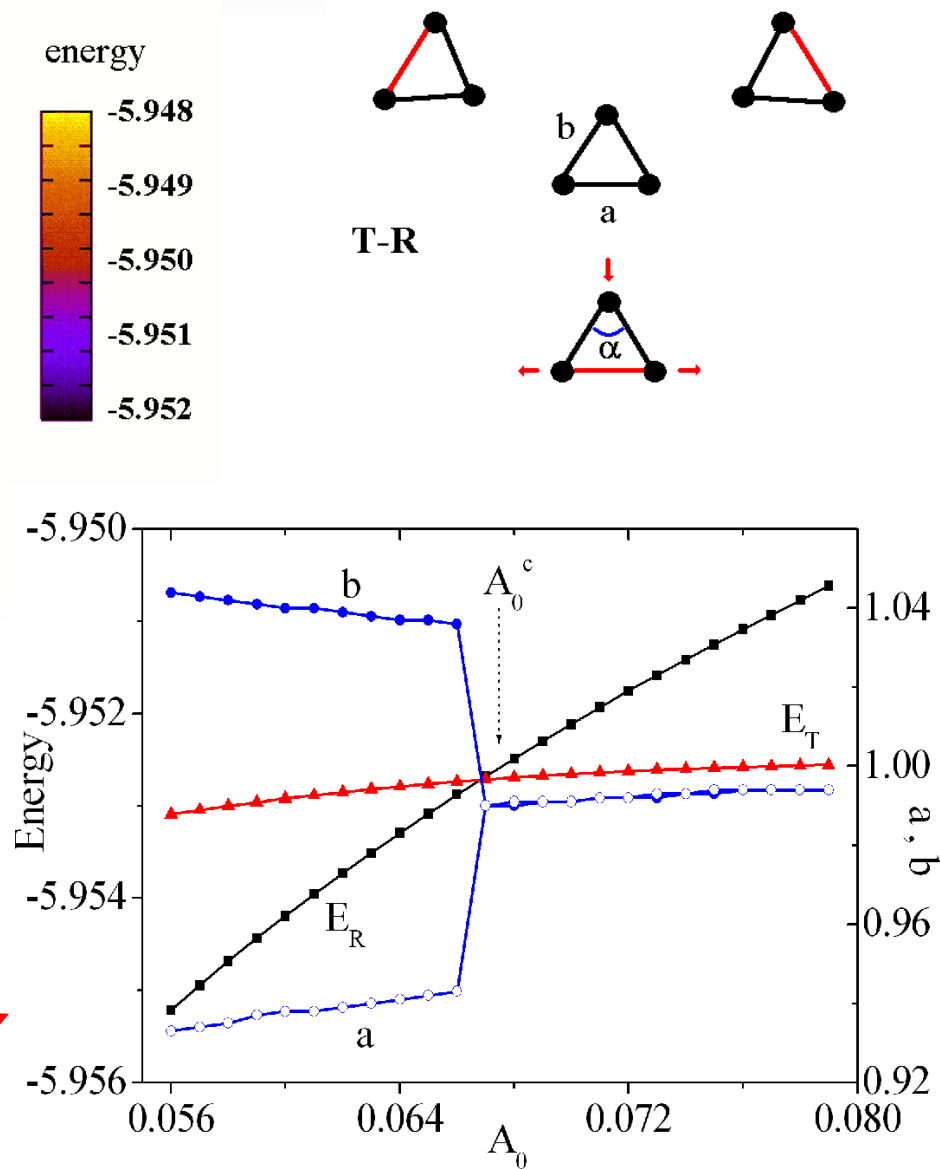
$$P_2 = f(A_2) \quad \text{para T-C}$$

Transición triangular-romboédrica (T-R)



Niveles de energía como función de los parámetros de red a y b en el punto de transición ($A_0^c = 0.067$)

Energía de las estructuras T y R y parámetros de red a y b vs. A_0



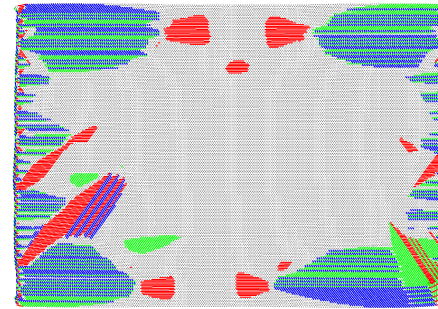
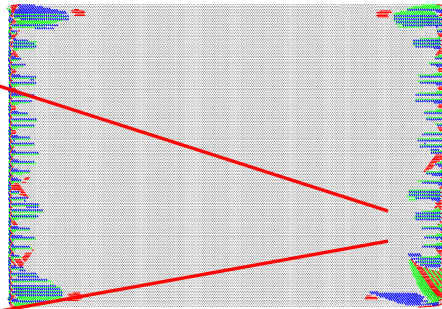
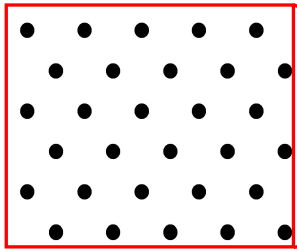
Nuestras simulaciones

Simulaciones de Langevin a temperatura cero - Algoritmo de Verlet

$$\mathbf{r}(t) = 2\mathbf{r}(t-dt) - \mathbf{r}(t-2dt) + dt^2 [\mathbf{f}(t-dt) - m \mathbf{v}(t-dt)]$$

$$\mathbf{v}(t) = [\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t-dt)] / dt$$

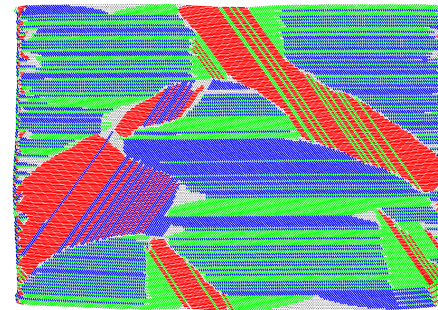
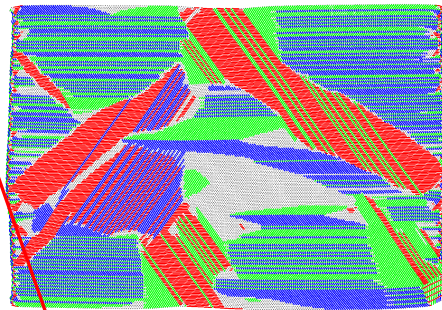
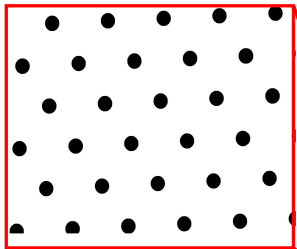
T



40.000 partículas

condiciones de contorno abiertas

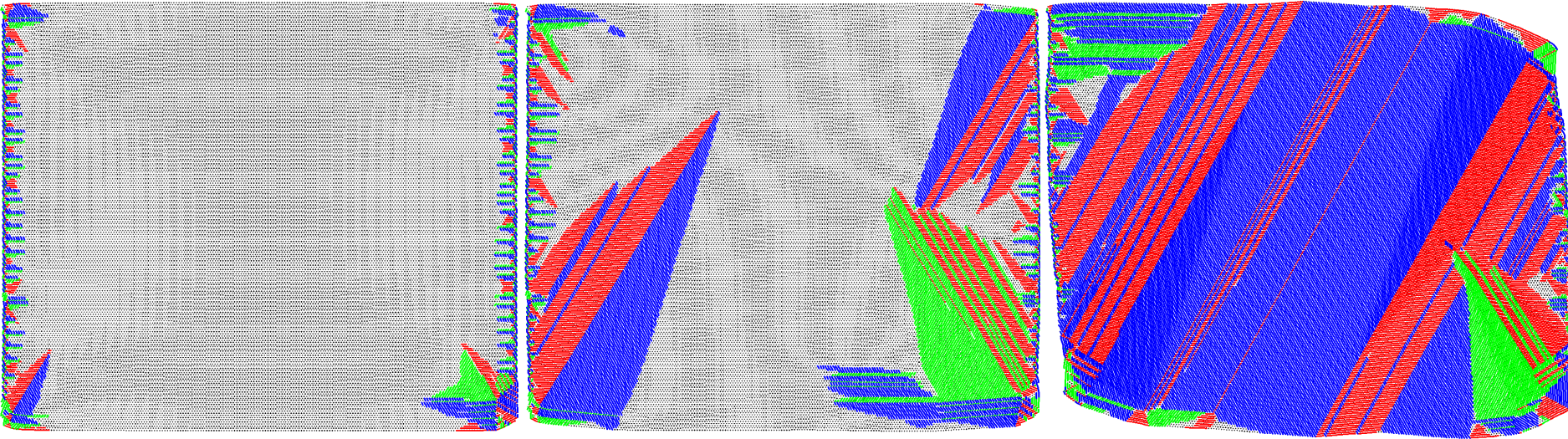
R



Transformación
inducida por
inestabilidades
mecánicas:
Energía térmica
no relevante

Transición T-R inducida por A_0

A_0 cumple el rol de la temperatura



$A_0 = 0.085$

$A_0^c = 0.067$

$A_0 = 0.061$

$A_0 = 0.051$

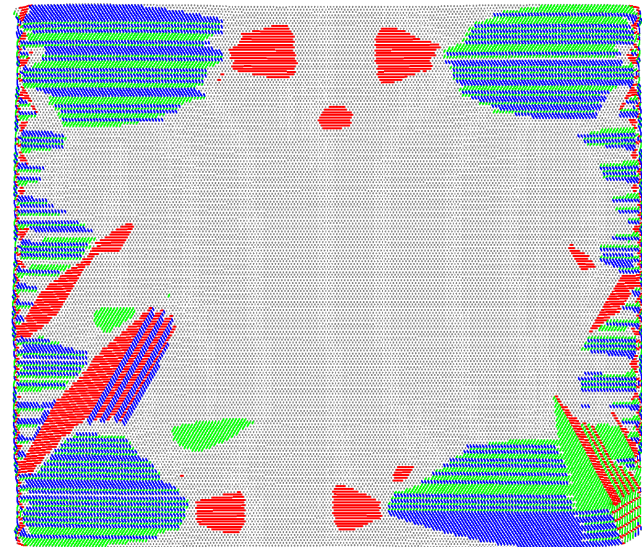
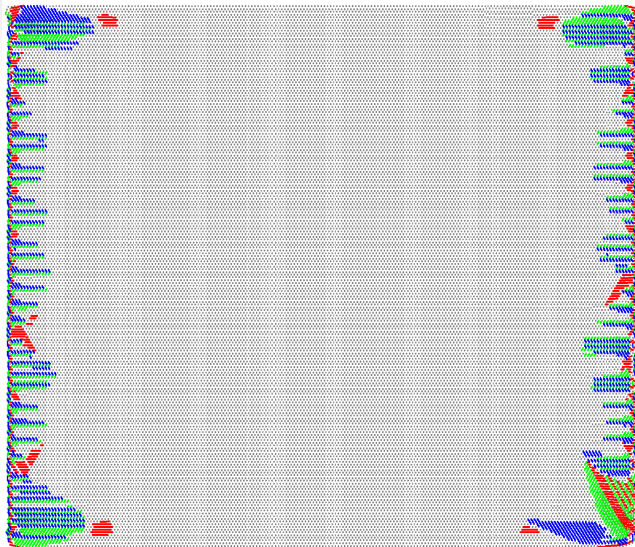
Transición reversible

Principal causa del efecto memoria de forma en nuestro modelo

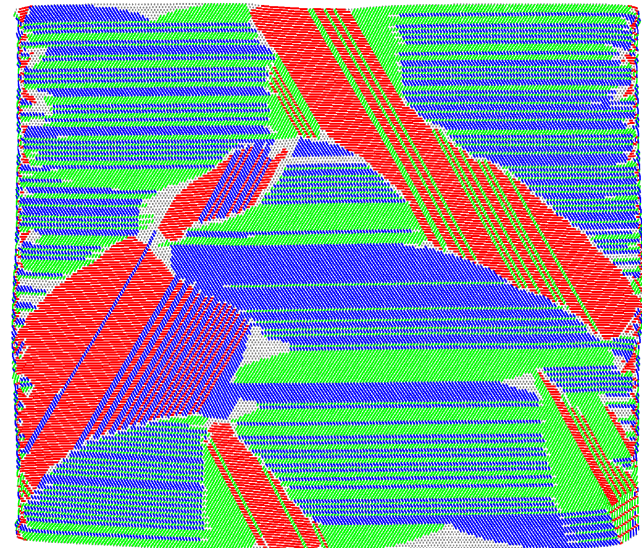
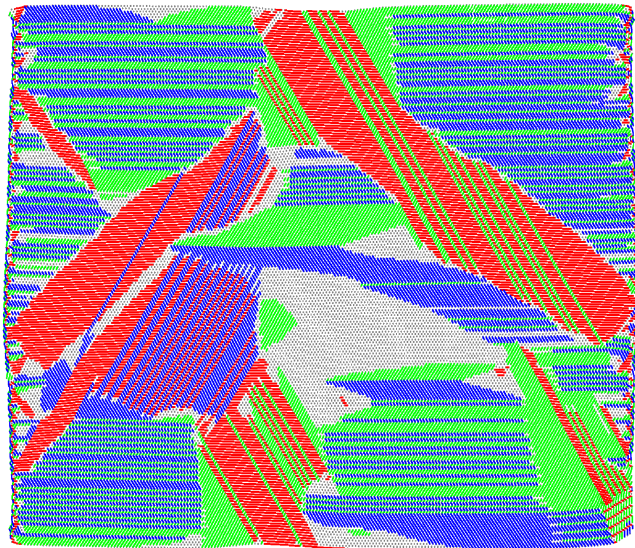
M.F.L. y E.A.Jagla, J.Stat. Mech. (2009) P09002

Transición T-R

Muestra preparada a $A_0 = 0.080$ ($A_0^c = 0.067$)

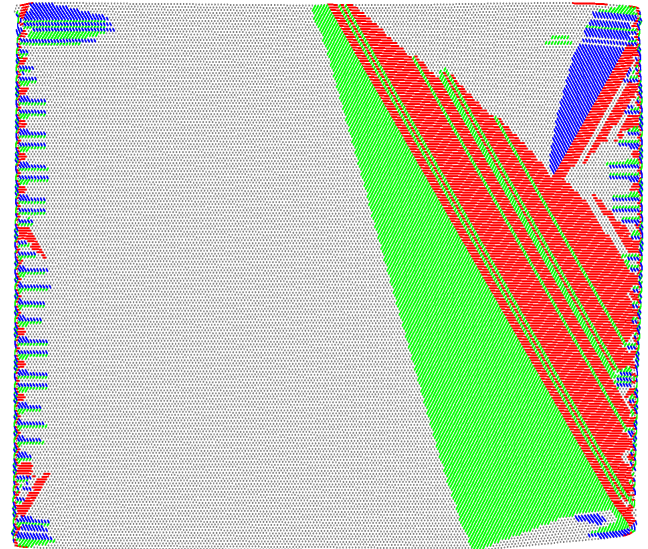
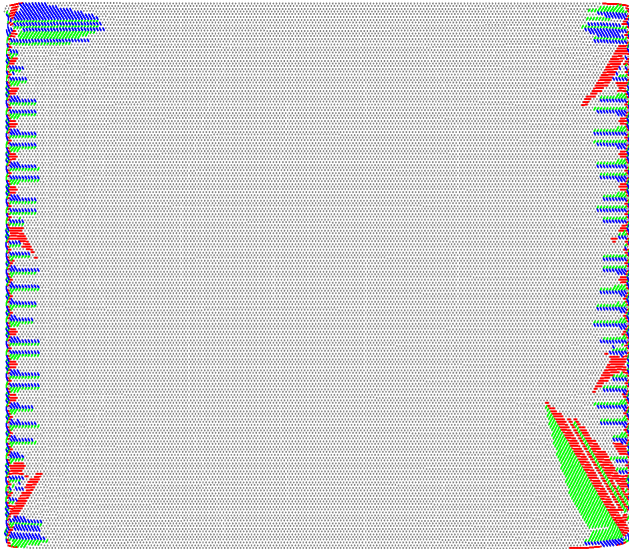


$A_0 = 0.057$

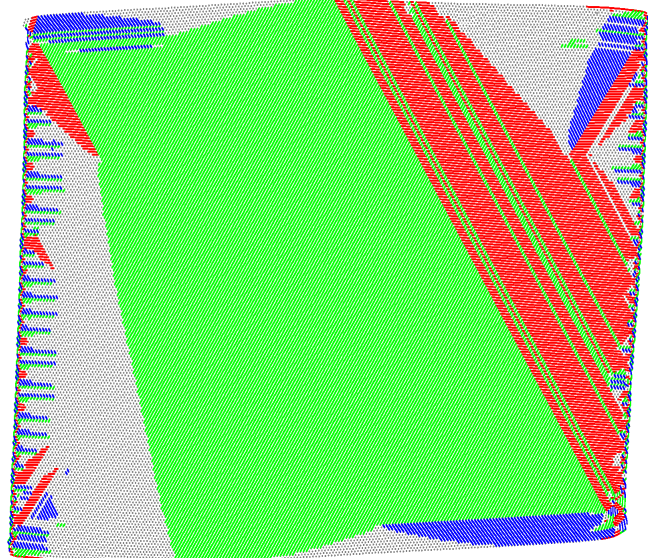
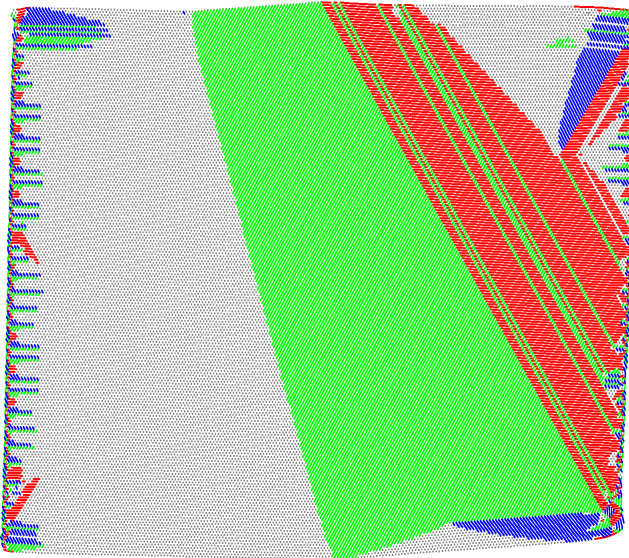


Transición T-R

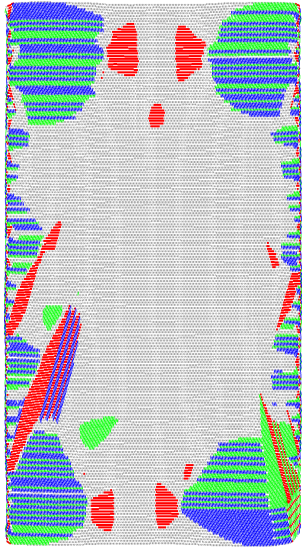
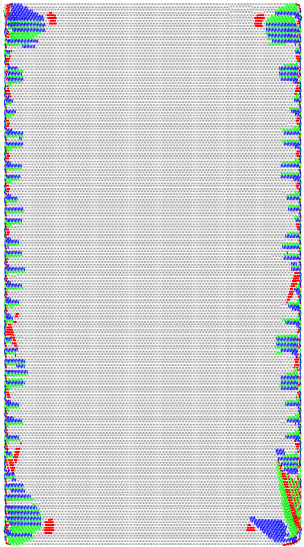
Muestra preparada a $A_0 = 0.080$ ($A_0^c = 0.067$)



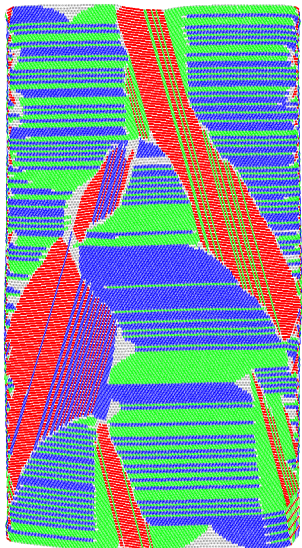
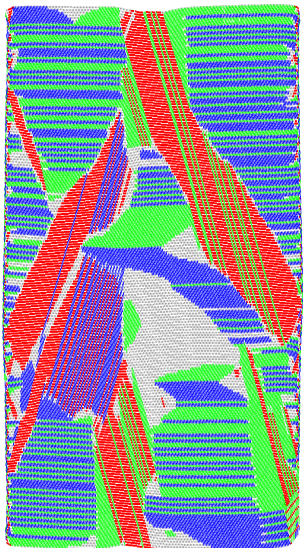
$A_0 = 0.063$



Transición T-R: Dependencia con A_0



$A_0 = 0.057$

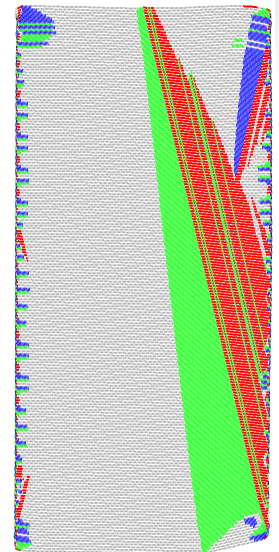
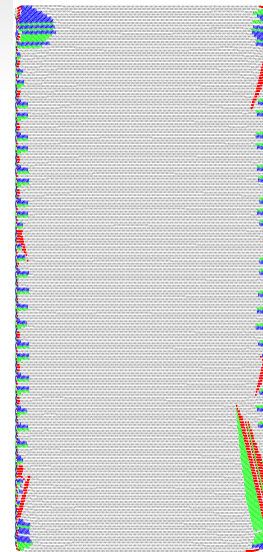


Cambio abrupto
de A_0

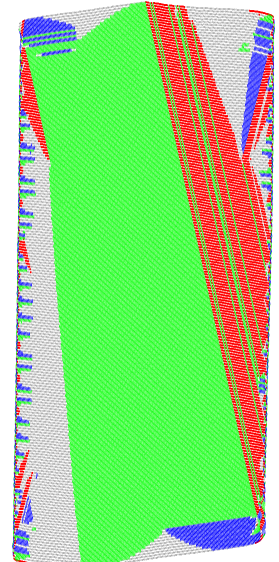
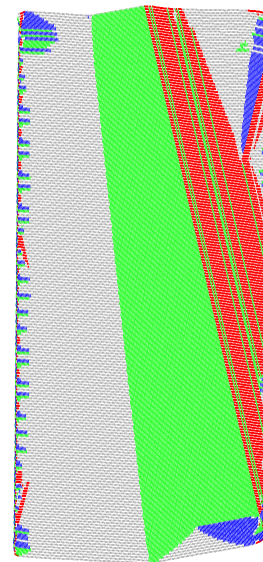
Condicion inicial:
 $A_0 = 0.080$

$A_0^c = 0.067$

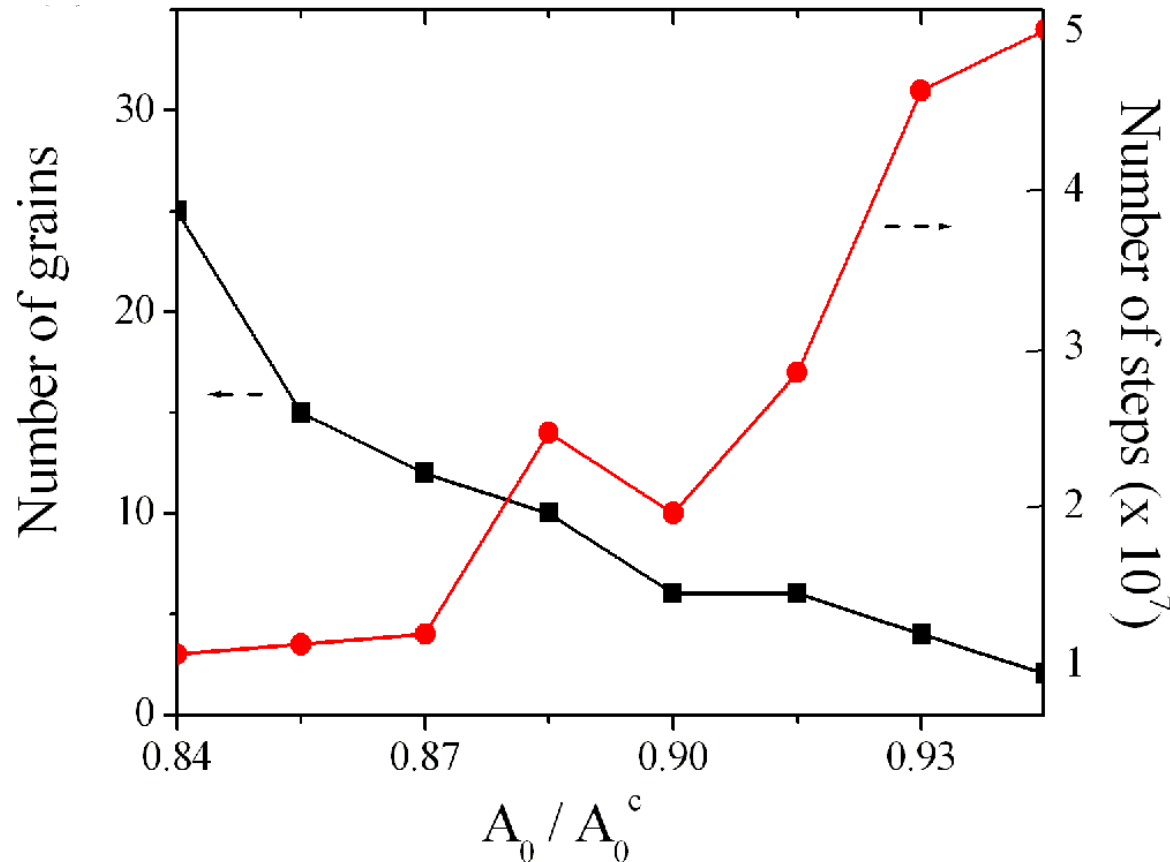
Enfriamientos
rápidos producen
una textura
martensítica mas
fina



$A_0 = 0.063$

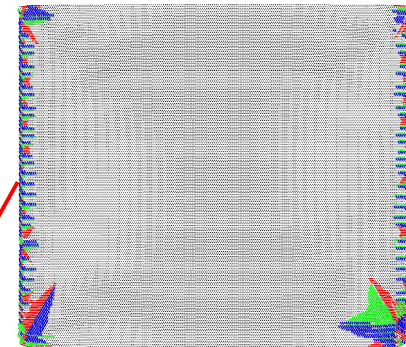
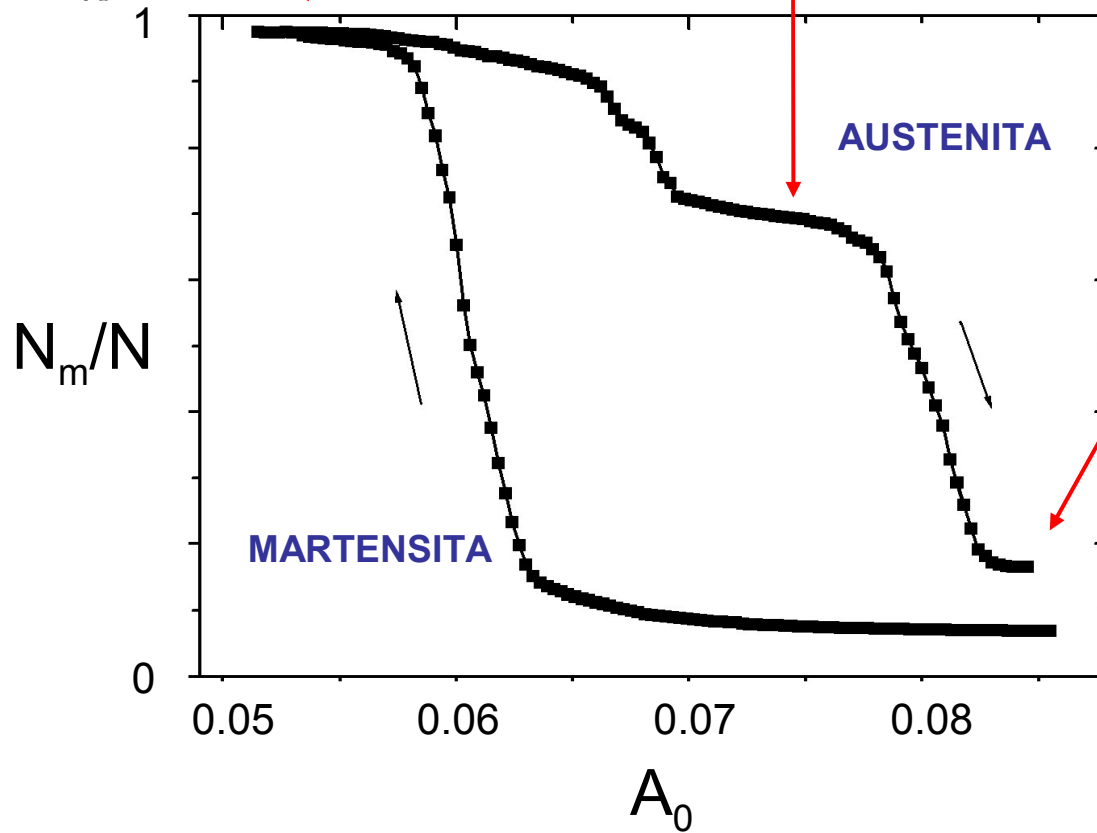
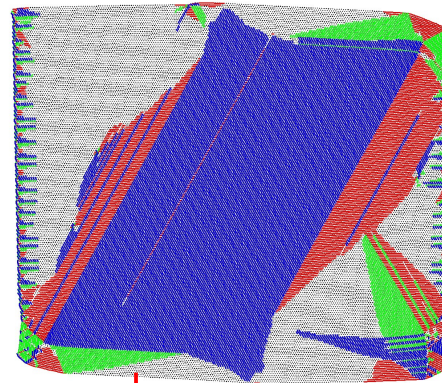
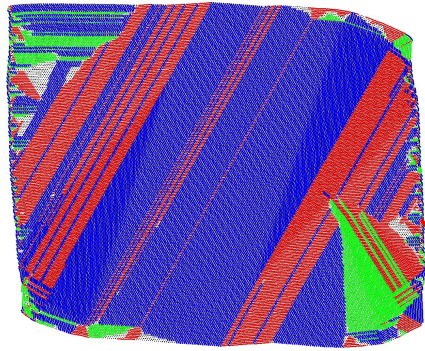


Transición T-R: Dependencia con la velocidad de cambio de A_0



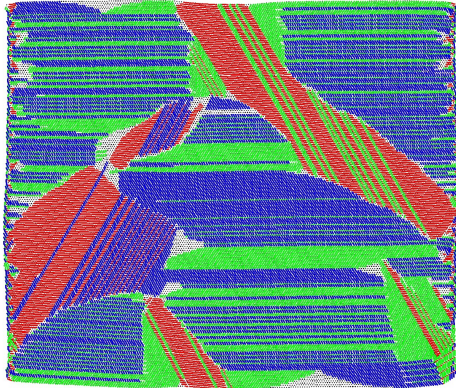
La **escala de tiempo** del proceso de transformación y el **tamaño de grano** obtenidos dependen fuertemente de la **velocidad de enfriamiento**, o, en otras palabras, de cuán lejos está A_0 de su valor en el equilibrio, A_0^c .

Ciclo de histeresis

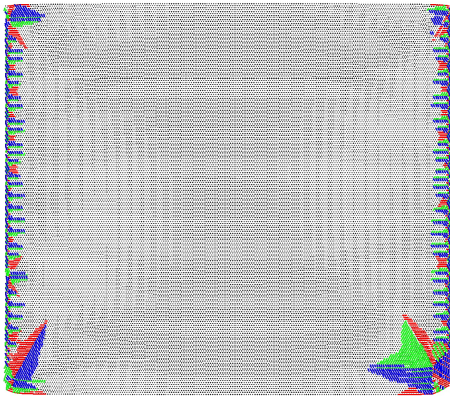


Dos ciclos de histéresis

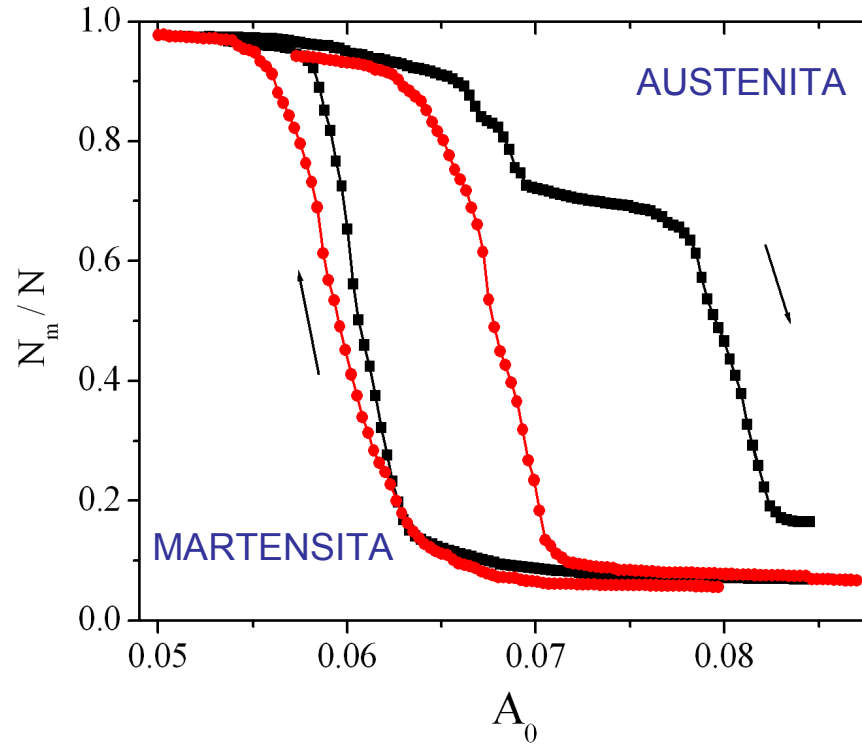
CICLO ROJO



CI

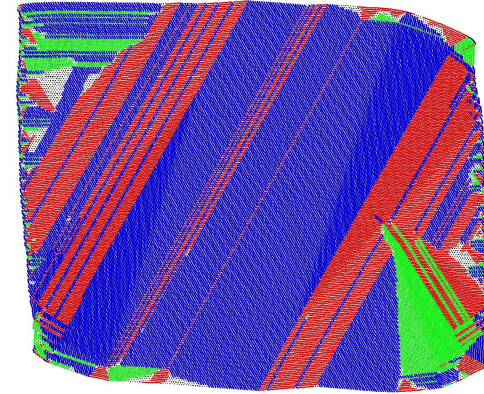


$A_0=0.075$

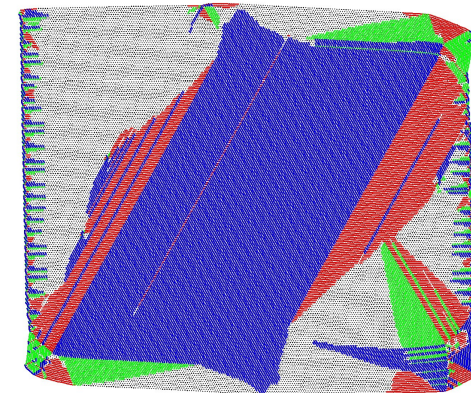


La forma del ciclo de histéresis depende fuertemente de la dinámica de la transformación

CICLO NEGRO



CI

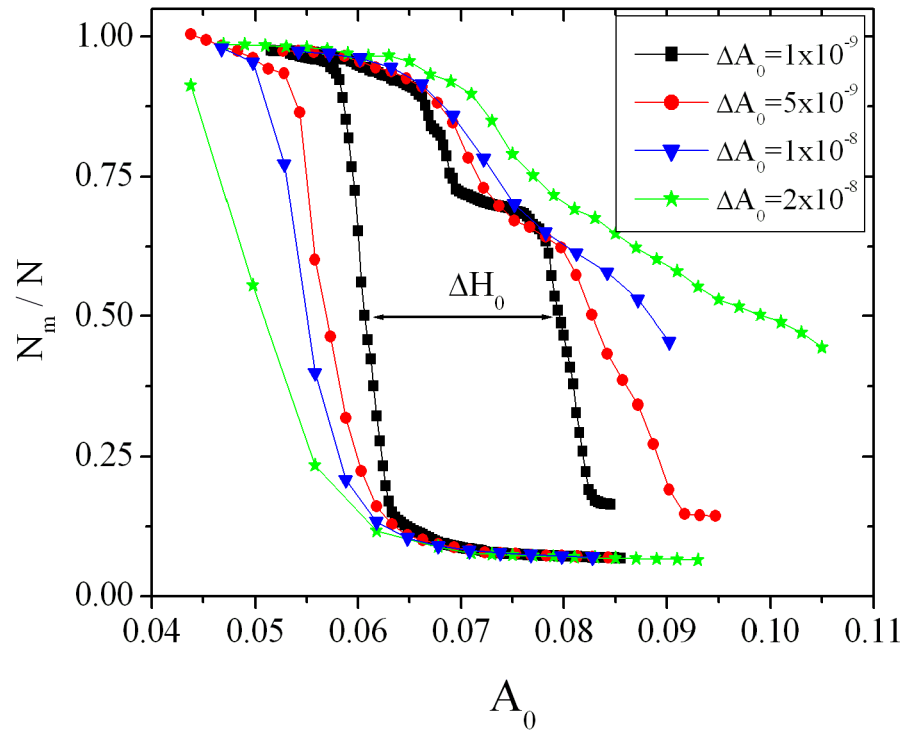


$A_0=0.075$

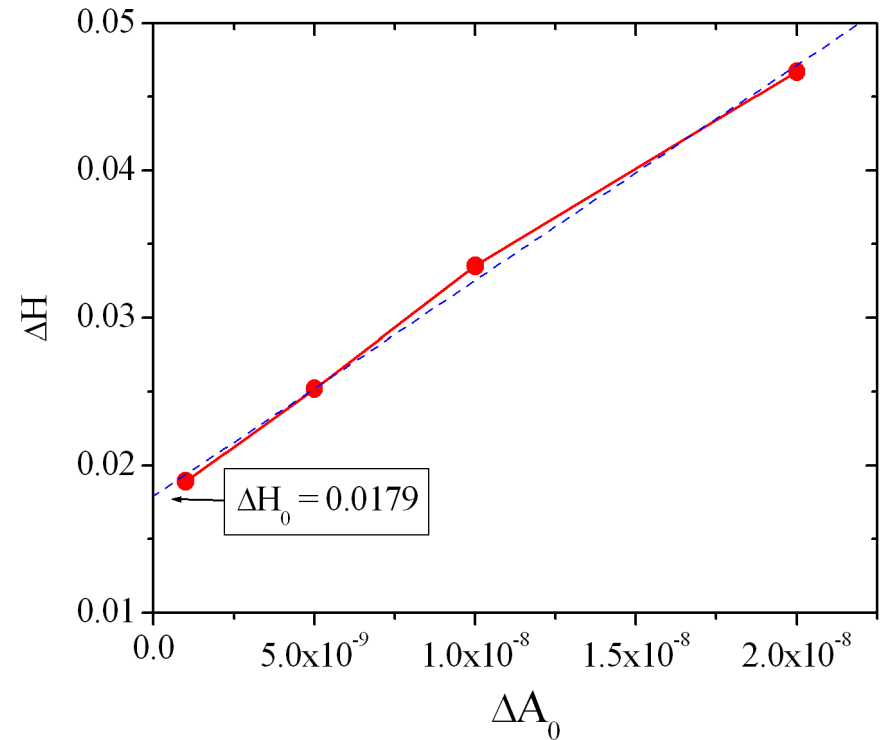
La histéresis está determinada por las barreras de nucleación de la muestra

Ciclos a velocidades distintas e histéresis intrínseca

ΔA_0 = velocidad de cambio de A_0



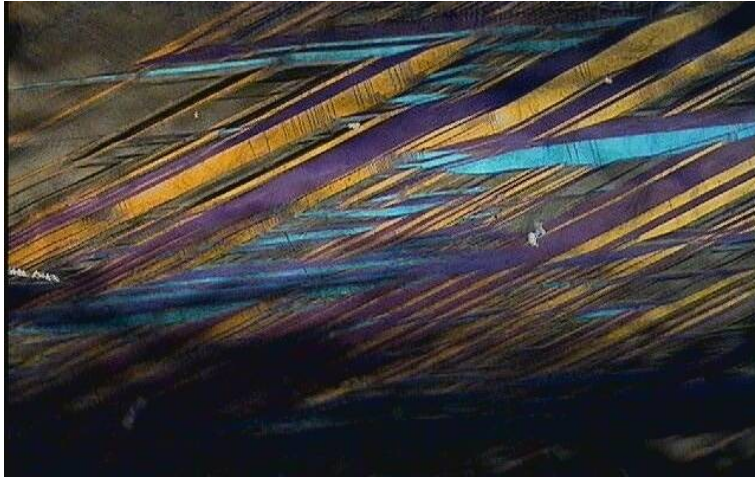
Evolución de la fracción de fase martensítica en cada ciclo



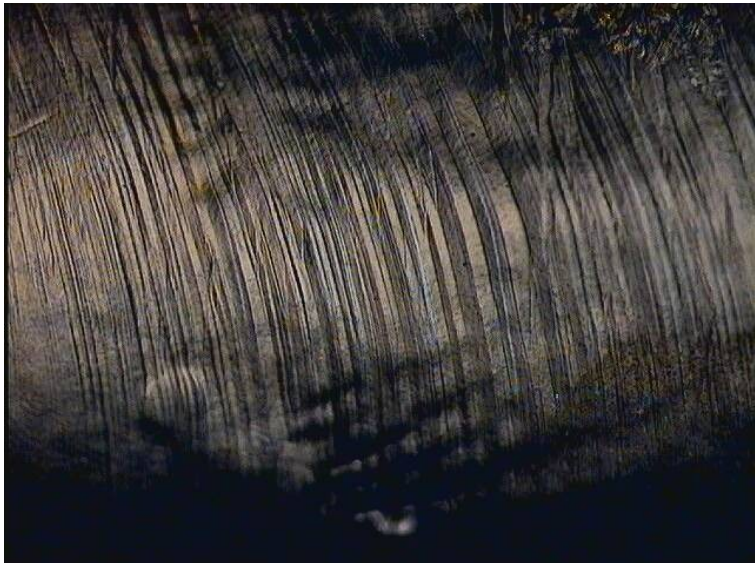
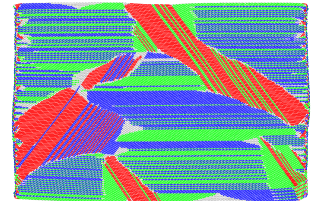
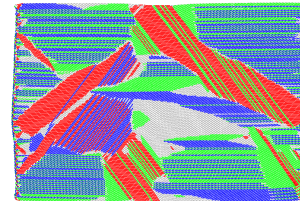
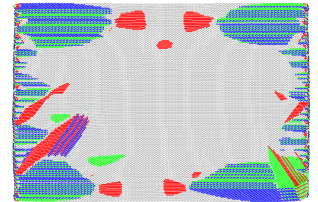
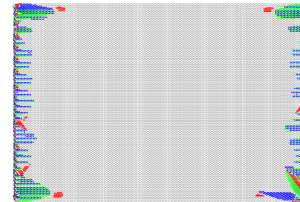
Ancho del ciclo de histéresis como función de ΔA_0

$\Delta H_0 > 0$ en el límite $\Delta A_0 = 0$ es una medida de la histéresis intrínseca de la transición

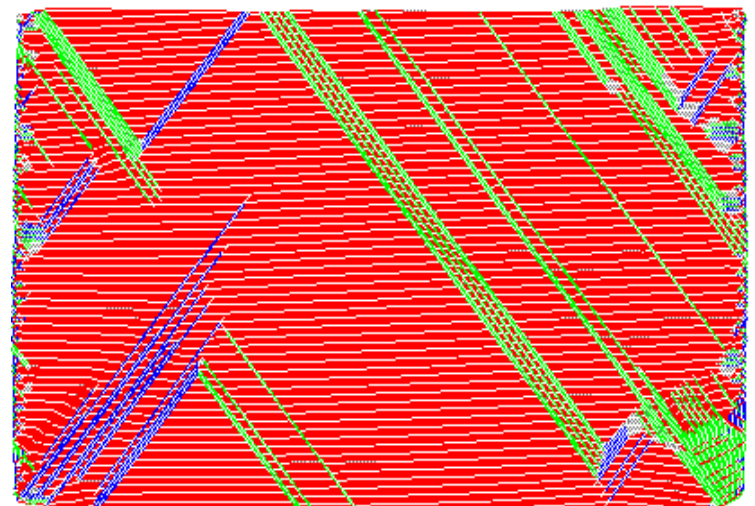
Reconversión de variantes bajo tensión



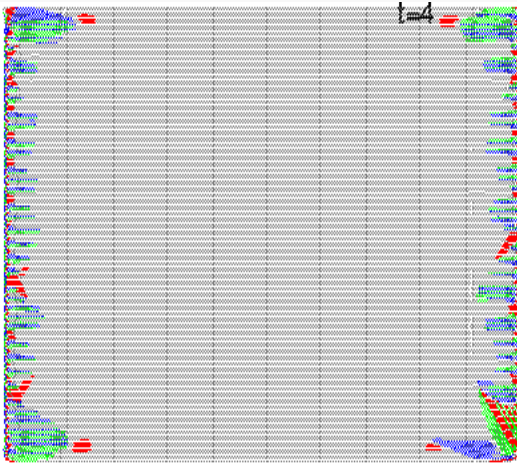
martensita



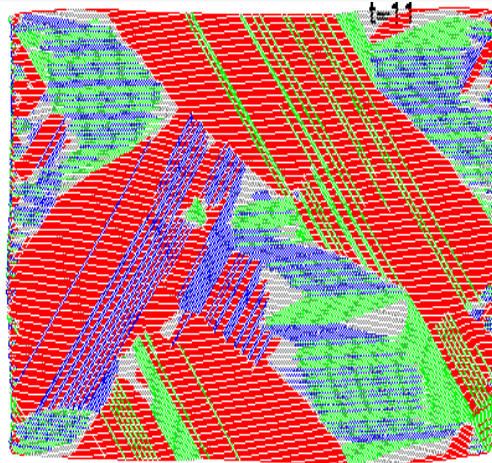
martensita
deformada



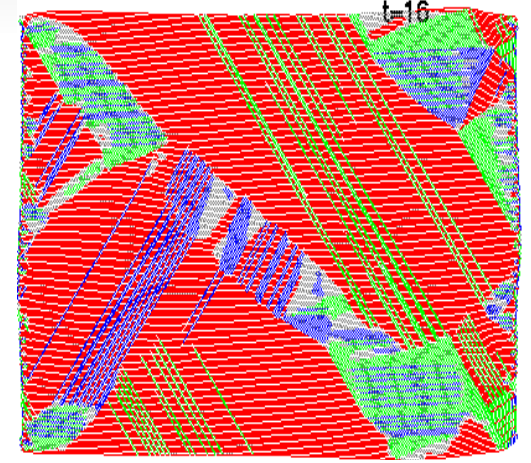
Efecto memoria de forma



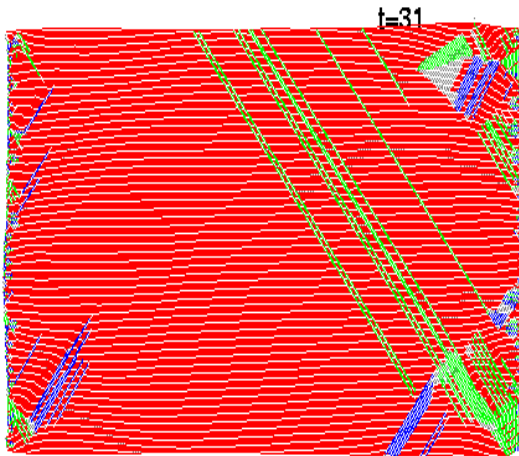
$$A_0 = 0.080, Fx=0$$



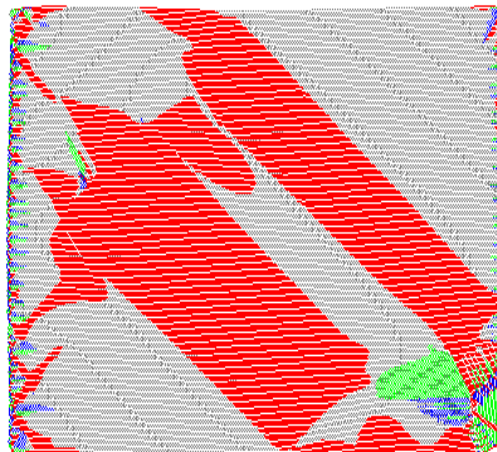
$$A_0 = 0.057, Fx=0$$



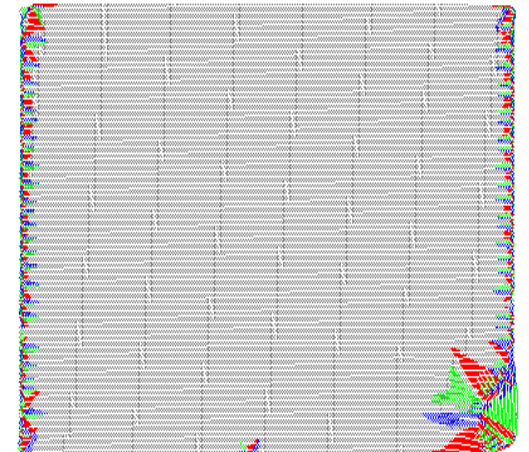
$$A_0 = 0.057, Fx>0$$



$$A_0 = 0.057, Fx=0$$

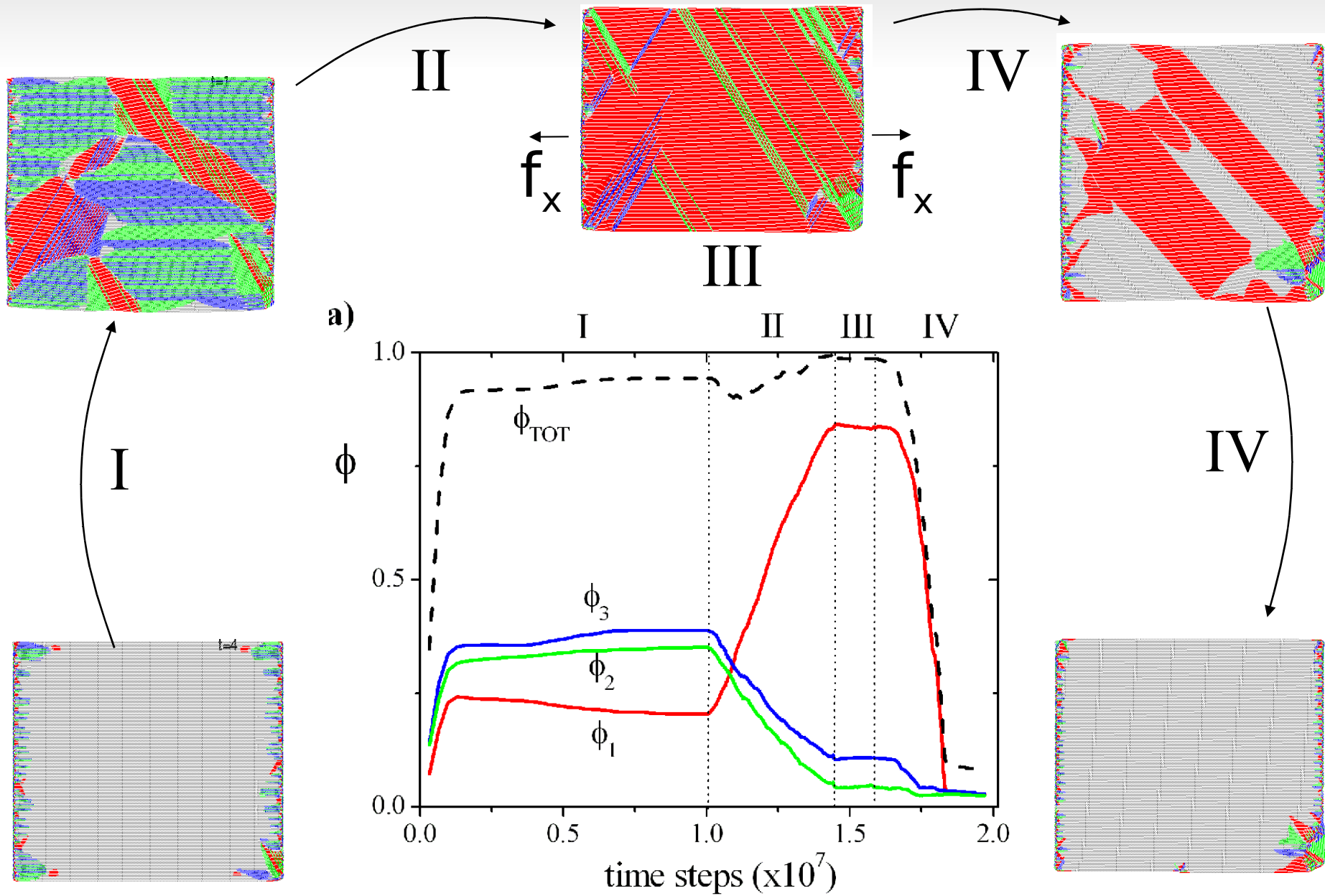


$$A_0 > 0.057, Fx=0$$

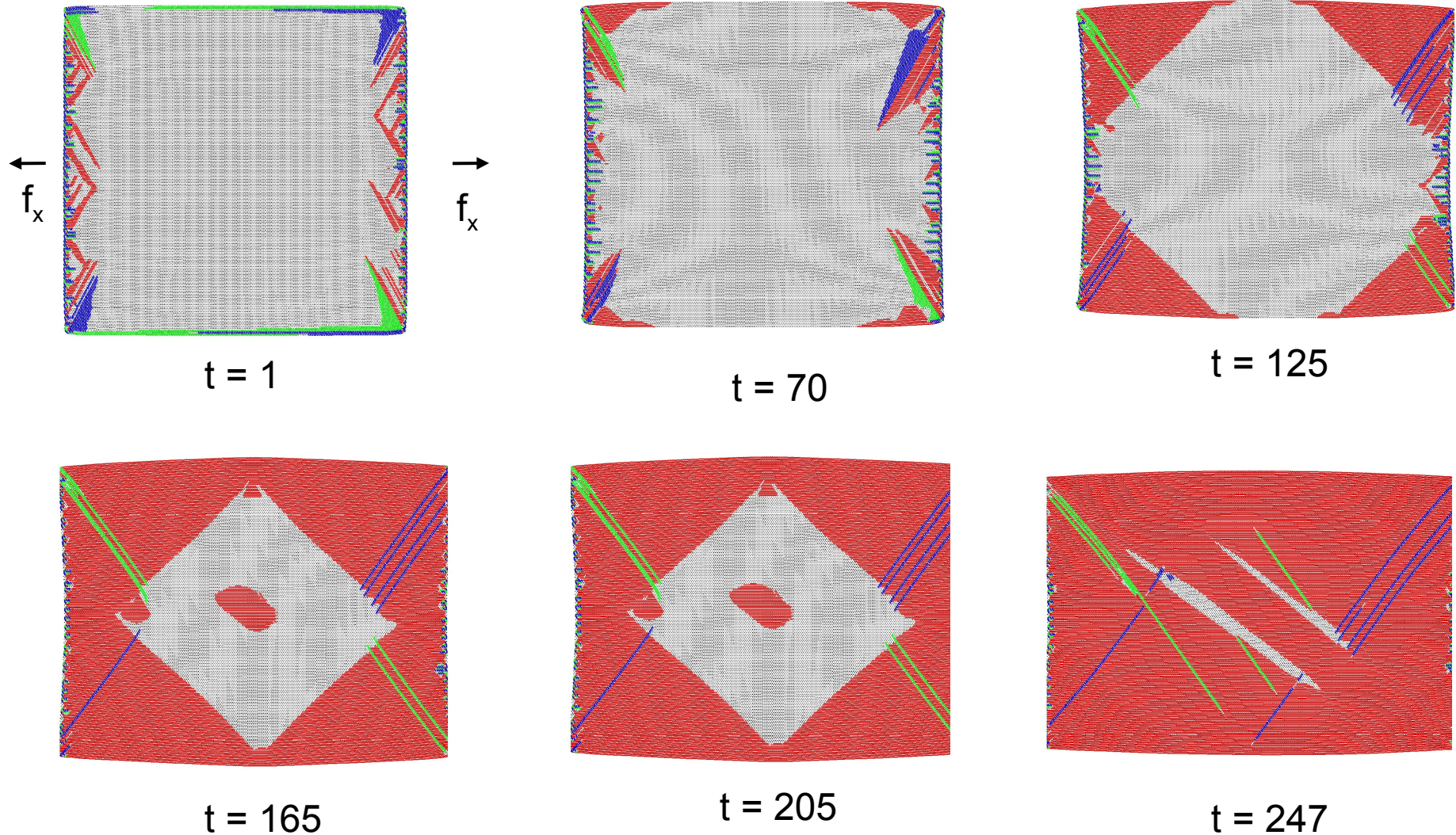


$$A_0 = 0.080, Fx=0$$

Efecto memoria de forma



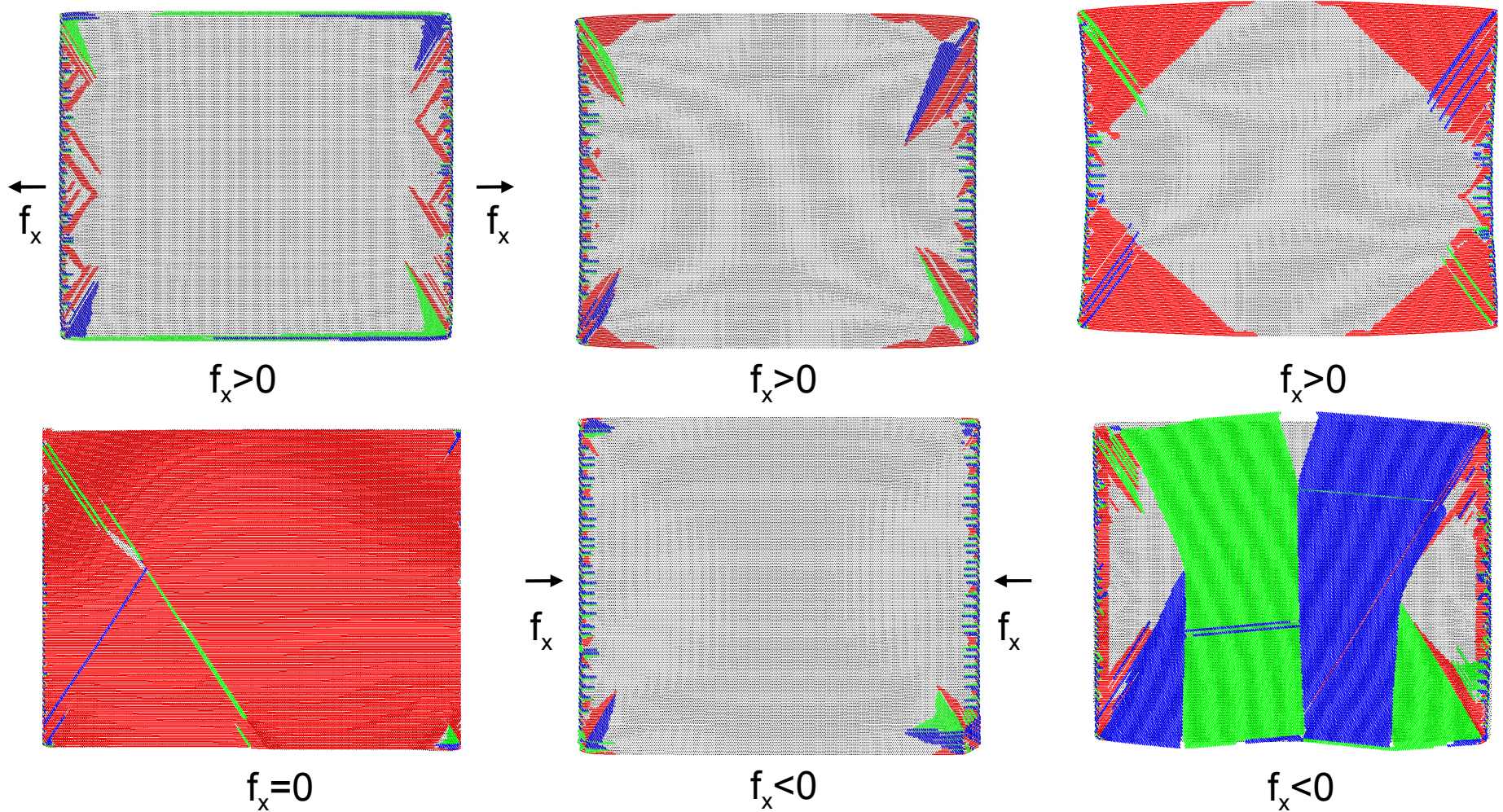
Transformación por tensión (primera parte)



$A_0 = A_0^c = 0.0675$ durante todo el proceso

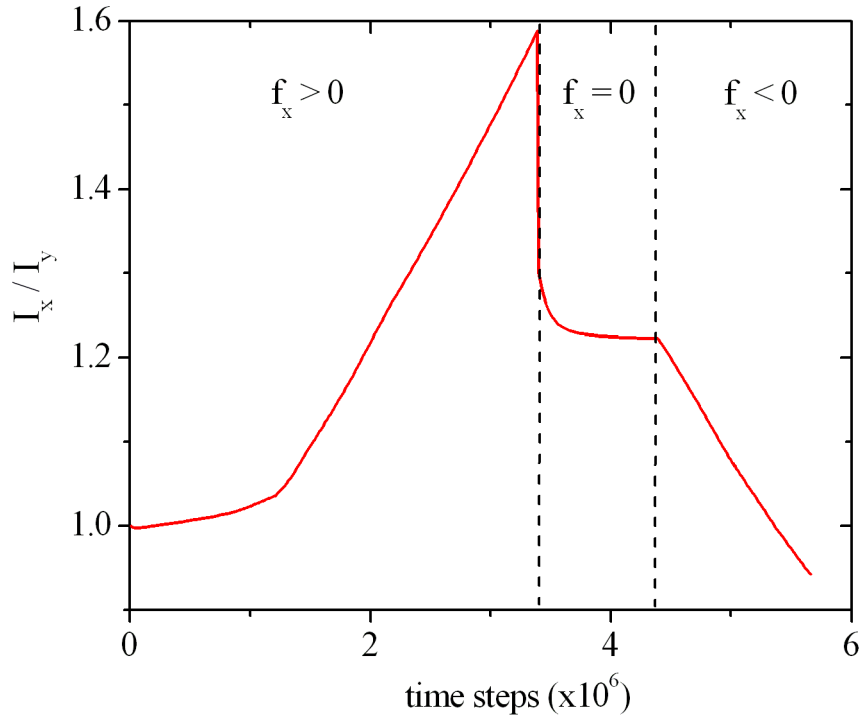
Transición T-R inducida por tensión

$$A_0 = A_0^c = 0.0675$$

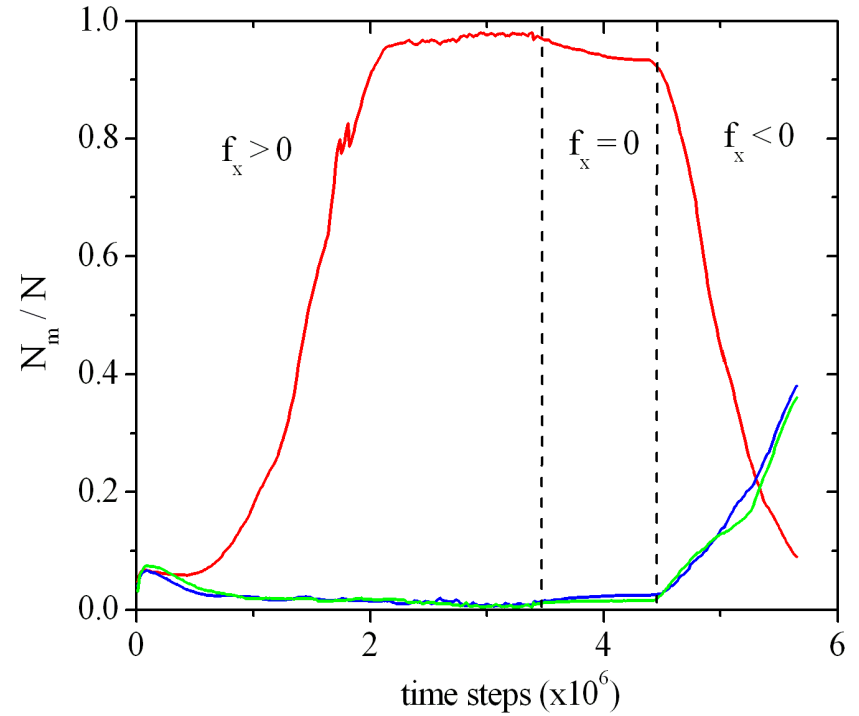


El estado inicial no se recupera para $f_x=0$ porque A_0 cae dentro de la región de histéresis

Transición T-R inducida por tensión



Aspect ratio de la muestra



Fracción de partículas en las tres variantes martensíticas

Este modelo podría presentar superelasticidad

COROLARIO

Los potenciales interatómicos simples en sistemas con un solo tipo de partícula pueden usarse exitosamente para estudiar muchos fenómenos asociados a las transformaciones martensíticas.