



AUTOINTERSTICIALES EN METALES HCP: CÁLCULOS AB-INITIO VS. EXPERIMENTOS

Roberto C. Pasianot* y Julián R. Fernández

*Gcia. Materiales, CAC-CNEA, Avda. Gral. Paz 1499, 1650 San Martín, Argentina.
CONICET.*

Instituto Sabato, UNSAM-CNEA.

**Correo Electrónico (autor de contacto): pasianot@cnea.gov.ar*

RESUMEN

Utilizando técnicas de Teoría del Funcional Densidad, estudiamos la estructura y posibles mecanismos de migración de autointersticiales para un conjunto de siete metales HCP a saber: Be, Mg, Ti, Co, Zr, Zn y Cd. Este conjunto barre todo el rango experimental de la relación axial/basal (c/a) y además comprende enlaces químicos donde intervienen orbitales de distinta naturaleza (sp y d). Mostramos la importancia de configuraciones de simetría reducida, en general no consideradas en la literatura, para sistematizar las tendencias presentes en los experimentos de recuperado bajo irradiación a muy bajas temperaturas.

ABSTRACT

Using Density Functional Theory techniques, we study the structure and possible migration mechanisms for a set of seven HCP metals including: Be, Mg, Ti, Co, Zr, Zn, and Cd. This set spans the whole experimental range of c/a ratios, also comprising chemical bonding stemming from orbitals of different nature (sp and d). We show the importance of reduced symmetry configurations, generally overlooked in the literature, in the systematization of tendencies revealed by experiments on the low temperature recovery after irradiation.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: T15

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): P (poster)