

Visualización de resultados en simulaciones de tipo atómico en el
campo de materiales / cristalografía.

Roberto Serrano López, Santiago Cuesta López

Universidad de Burgos.

Parque Científico y Tecnológico, Edificio I+D+i. Plaza Misael Bañuelos s/n

Noviembre de 2013

ISBN: 978-84-695-9418-6

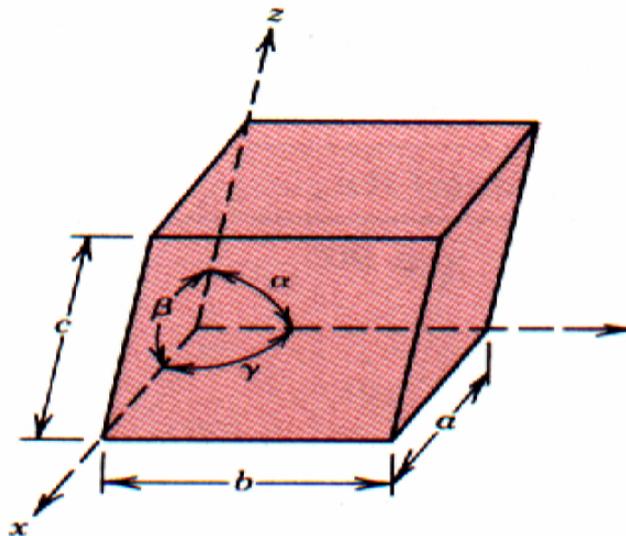
Capítulo 1

Nociones básicas de la estructura atómica de los materiales

De forma previa a la introducción a los programas específicos de visualización, resulta necesario realizar un breve repaso a ciertas nociones básicas sobre redes cristalinas que facilitarán a los alumnos la interacción con los propios menús, así como el significado de alguno de los parámetros.

1.1. Estructuras cristalinas

Las estructuras cristalinas de la materia (en contraposición a los estados amorfos) hacen referencia a una forma de ordenamiento interno de los átomos con cierta periodicidad espacial, de manera que puede identificarse una unidad elemental o *celda unidad (unit cell)* que se repite en las tres direcciones hasta formar una red. Estudiada de forma separada, la celda unidad es la menor porción de material que mantiene las mismas propiedades geométricas que el resto de red. Esta celda se puede caracterizar por la longitud de sus aristas (a , b , c) y el ángulo entre ellas (α , β , γ).



De estudio de las posibles configuraciones tridimensionales, se han observado 14 tipos distintos de celdas unitarias (redes de Bravais), que pueden agruparse a su vez en 7 sistemas cristalinos (Cuadro 1.1).

Los tipos más habituales de celdas unitarias en metales son los **BCC** (Body Centered Cubic, Cúbico Centrado en el Cuerpo), **FCC** (Face Centered Cubic, Cúbico Centrado en las Caras), y **HCP** (Hexagonal Closed-Packed, Hexagonal Compacta) (Fig. 1.1).

1.1.1. Características propias de una red

Una de las características de cada tipo de celda es el *parámetro de red (lattice parameter)*, es decir, la distancia constante entre celdas de una red cristalina. Así, en las cúbicas se utiliza únicamente el parámetro a , ya que la distancia es la misma para las tres direcciones ($a=b=c$). Mientras tanto en la hexagonal necesitamos

SISTEMA CRISTALINO	DIMENSIONES	REDES DE BRAVAIS
Cúbico	$a = b = c$	Simple
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Centrada en el cuerpo
		Centrada en las caras
Tetragonal	$a = b \neq c$	Simple
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Centrada en el cuerpo
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	Simple
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Centrada en el cuerpo
		Centrada en las caras
		Centrada en las bases
Romboédrico o trigonal	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Simple
Hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ y $\gamma = 120^\circ$	Simple
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	Simple
	$\alpha = \beta = 90^\circ$ y $\gamma \neq 90^\circ$	Centrada en las bases
Triclínico	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Simple

Cuadro 1.1: Tipos de sistemas cristalinos y redes de Bravais.

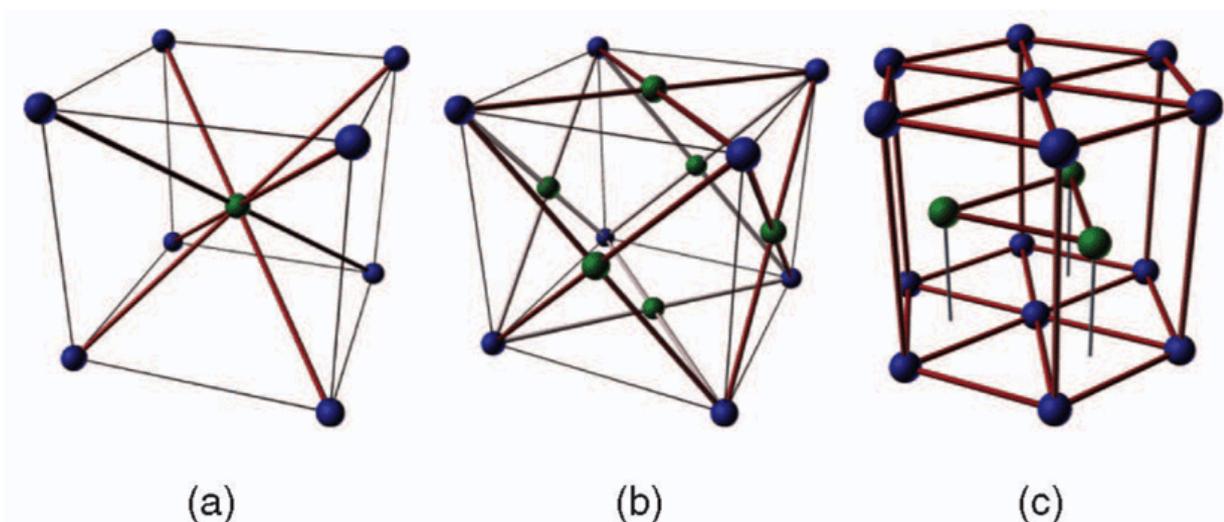


Figura 1.1: Ejemplos esquemáticos de las redes BCC (a), FCC (b), y HCP (c).

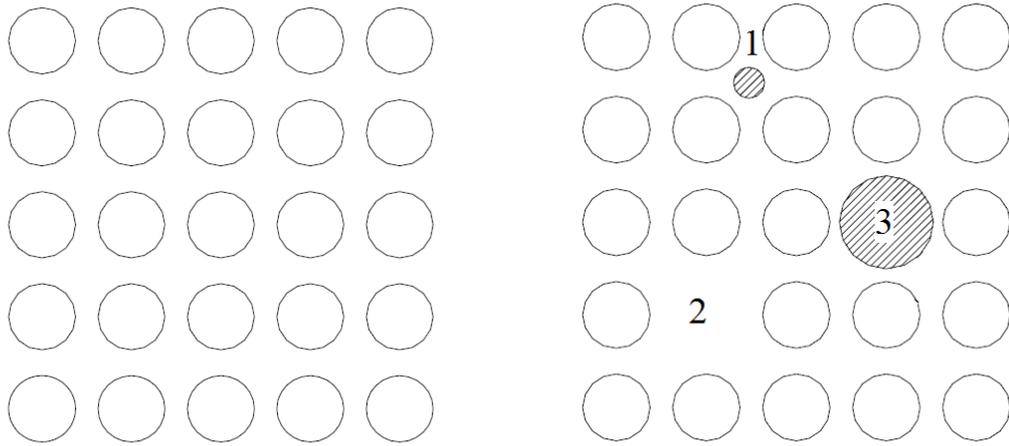


Figura 1.2: Defectos puntuales (derecha) sobre una estructura perfecta (izquierda): intersticial (1), vacante (2) y sustitución (3).

a y c , ya que $a=b$. También se consideran parámetros de red a los ángulos que definen las direcciones de los ejes en cada caso. Puede establecerse una relación puramente geométrica radio atómico y el parámetro de red.

Por otro lado, puede definirse el *número de coordinación* (**CN**, *coordination number*), que da una idea del empaquetamiento propio de la red mediante el conteo de átomos vecinos. Este valor permite observar posibles variaciones o movimientos que se produzcan respecto a las posiciones iniciales, por ejemplo, durante la ejecución de simulaciones a escala atómica. Otra característica será la fracción ocupada por los átomos, supuestos como esferas rígidas, en el conjunto de la celda. A este valor se denomina *factor de empaquetamiento atómico* (**APF**, *atomic packing factor*)

$$APF = \frac{N^{\circ} \text{ de átomos por celda} \times \text{Volumen de cada átomo}}{\text{Volumen de la celda}}$$

En el siguiente cuadro se resumen las características de las redes habituales en metales:

Red	Nº at./celda	Parámetro	CN	APF	Ejemplos
BCC	2	$a = \frac{4 \cdot r}{\sqrt{2}}$	8	0.68	Fe, Ti, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Cr, Zr
FCC	4	$a = \frac{4 \cdot r}{\sqrt{3}}$	12	0.74	Fe, Cu, Al, Au, Ag, Pb, Ni, Pt
HCP	6	$a = 2 \cdot r$ $c = 1,663 \cdot a$	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co,Zr, Cd

1.2. Defectos en redes cristalinas

Cualquier variación en la estructura teórica perfecta de la red implica la existencia de un defecto. Sea cual sea su naturaleza, la presencia de defectos altera el equilibrio interno de la red perfecta, e implica la aparición de tensiones internas.

Los *defectos puntuales* son los que ocurren en posiciones determinadas de la red. Así, podemos encontrar átomo *intersticiales*, posiciones *vacantes*, y átomos *sustitucionales* (figura 1.2).

Por otro lado, existen defectos lineales del tipo *dislocación* que pueden surgir tanto en la solidificación del material, como durante un proceso de deformación plástica. En este caso, aparecen planos intercalados en el seno de la estructura, pero en principio formados por los mismos átomos originales del mismo material. La presencia de una plano adicional exige la aparición de zonas comprimidas y zonas traccionadas en el entorno de los límites de la dislocación.

Las dislocaciones, en general, pueden desplazarse en el interior del cristal, e incluso subdividirse y seguir moviéndose (aumentando en número total de dislocaciones). El movimiento se produce sobre un plano específico, y según una dirección concreta, que de forma conjunta se comprenden como un sistema de deslizamiento, existiendo un número determinado de sistemas de deslizamiento principales en cada tipo de estructura. Estos sistemas plano-dirección serán los que preferentemente aparecerán en cada estructura, y están asociados a los

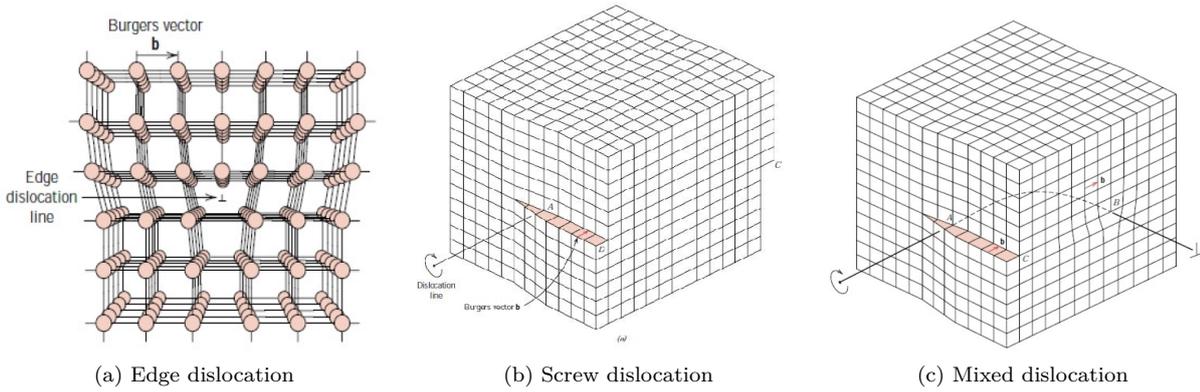


Figura 1.3: Tipos de dislocaciones.

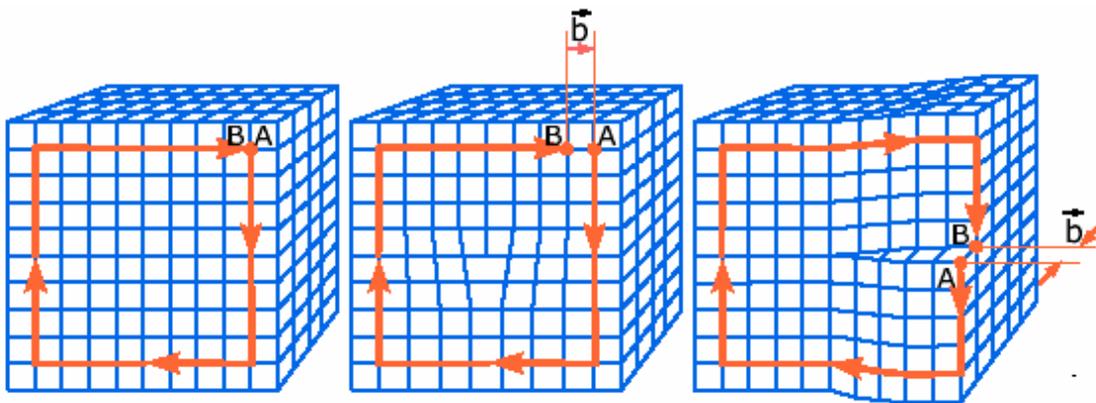


Figura 1.4: Vector de Burgers para dislocaciones lineales y de tornillo.

que requieren un menor trabajo (es decir, energía) para ser activados. En particular, se reconocen 3 sistemas preferenciales para la HCP; 12 sistemas para FCC; y entre 12 y 48 para BCC (dependiendo de la temperatura). El conocido como *vector de Burgers* (\vec{b} , *Burgers vector*) permite caracterizar la dislocación, señalando la magnitud y dirección de ésta (Fig. 1.4).

Pueden distinguirse además, varios tipos de dislocaciones. La más sencilla es la dislocación en arista, lineal o en cuña (*edge dislocation*), en la que un átomo aparece desplazado linealmente de su posición original en la red. Su movimiento queda acotado al plano formado por el vector de Burgers y la línea de dislocación (los cuales son perpendiculares). Por otra parte pueden aparecer dislocaciones de tornillo (*screw dislocation*) en las que el vector de Burgers es paralelo a la línea de dislocación, produciéndose el movimiento en un plano tangencial. La transición entre ambos tipos es la denominada dislocación mixta (*mixed dislocation*), cuyo vector de Burgers puede ser resuelto mediante la suma vectorial de una componente lineal y otra de tipo tornillo (Fig. 1.3).

Otro posible defecto en el cristal es la ausencia completa de un plano en la red teórica del cristal, denominándose en este caso fallo de apilamiento (*stacking fault*). Aparece en este caso una interrupción de la secuencia en la dirección de planos de máximo empaquetamiento (*close-packed planes*) correspondiente al cristal perfecto.

Deben de tenerse en cuenta, además, que las condiciones ideales de la red tampoco se cumplen en los contornos de los cristales. Aparecen así los denominados bordes de grano (*grain boundaries*) como los límites de cristalización que separan zonas ordenadas con diferentes direcciones en el espacio. Estos bordes de grano poseen una vital importancia en la resistencia final del material policristalino y su dureza. Deben de distinguirse bordes de grano de bajo ángulo de desalineamiento (*low or small-angle grain boundary*) y de alto ángulo (*high-angle grain boundary*) (Fig. 1.5). Un tipo especial son los bordes gemelos (*twin boundaries*) en los que aparece una simetría entorno a los mismos; éstos pueden aparecer cuando los desplazamientos atómicos son producidos por fuerzas tangenciales externas (*mechanical twins*), o bien debido a procesos de alineación derivados de tratamientos térmicos tras deformación (*annealing twins*). Cuando el ángulo de desalineación es paralelo al propio borde, se habla de borde de giro (*twist boundary*), la cual puede describirse como un conjunto de dislocaciones tipo tornillo. Y otro tipo particular de borde es el denominado de inclinación (*tilt boundary*), que surge como una simple alineación de dislocaciones lineales.

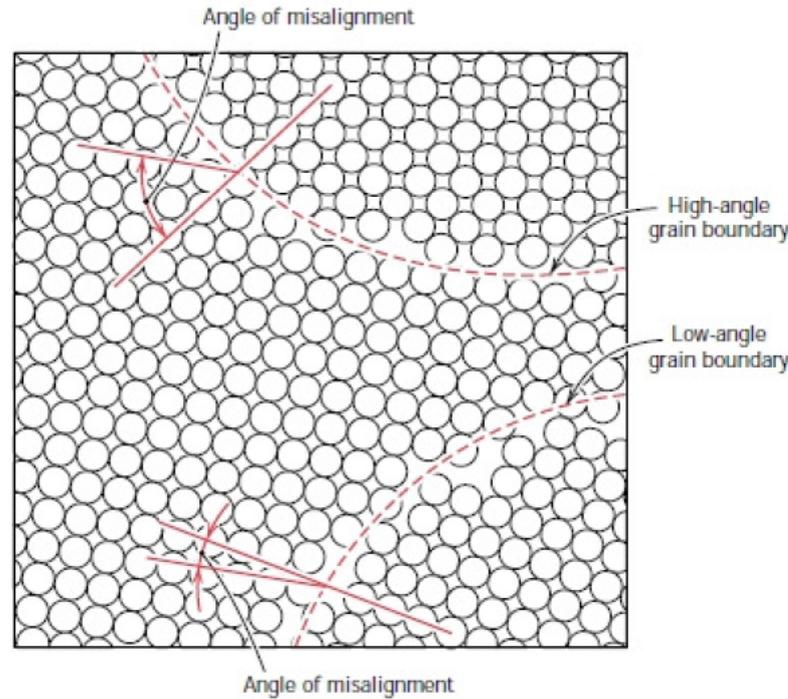


Figura 1.5: Bordes de grano de alto y bajo ángulo de desalineación.

1.3. Métodos de caracterización de estructuras para sólidos cristalinos

En un determinado momento resulta interesante conocer si una determinada zona de una muestra de material cumple con determinadas características de una estructura teórica, o si por el contrario sus átomos no siguen un patrón que corresponda a algún tipo conocido (estructura localmente desordenada, defectos, superficies de contorno). Pueden aplicarse en este caso varios análisis específicos, como por ejemplo:

1. Filtrado de energías potenciales, como indicador para decidir si un átomo forma parte de una red perfecta junto a sus vecinos o si (cuando la energía supera cierto límite) se trata de defectos. Las limitaciones de este método han hecho que prácticamente ya no se utilice.
2. El parámetro de *centrosimetría* (*CSP*, *CentroSymmetry Parameter*), propiedad que cumplen ciertas estructuras como FCC o BCC, puede ser aplicado para detectar cuando se dejan de cumplir localmente las condiciones simétricas:

$$CSP = \sum_{i=1}^{N/2} |r_i + r_{i+N/2}|^2$$

Partiendo de un N prefijado (8 para BCC y 12 para FCC), el valor de *CSP* será en principio cercano al nulo cuando el átomo forma parte de una estructura ordenada, y será no-nulo en el caso de defectos. Ajustando el valor del parámetro, podrían distinguirse incluso entre el tipo de defecto en cada caso (apilamiento, dislocación parcial...).

3. El análisis de orden de enlace (*Bond Order analysis*), utilizado para distinguir fracciones de material (por ejemplo, entre fase sólida y líquida) mediante un estudio matemático de invariantes (*Steinhardt order parameters*) que son características de cada estructura cristalina.
4. El análisis de ángulos de enlace (*Bond angle analysis*), mediante el cálculo de los ángulos formados entre un átomo y sus vecinos, y su posterior comparación con las estructuras más importantes.
5. El análisis tipo Voronoi (*Voronoi analysis*), que permite determinar en número de coordinación de una partícula mediante un método puramente geométrico, contando las caras del poliedro (producido mediante la descomposición de Voronoi) que rodea esa partícula. La disposición de los vecinos es computada mediante el recuento (en un vector compacto n_2, n_3, \dots, n_6), para cada uno de ellos, del número de caras

Red	Cutoff distance	Nº vecinos teórico
BCC	$r_c^{BCC} = \frac{1}{2} (\sqrt{2} + 1) a \simeq 1,207a$	$N=14$
FCC	$r_c^{FCC} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + 1 \right) a \simeq 0,8536a$	$N=12$
HCP	$r_c^{HCP} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{4+2x^2}{3}} \right) a$, con $x = \frac{c/a}{1,633}$	$N=12$

Cuadro 1.2: Cutoff en CNA.

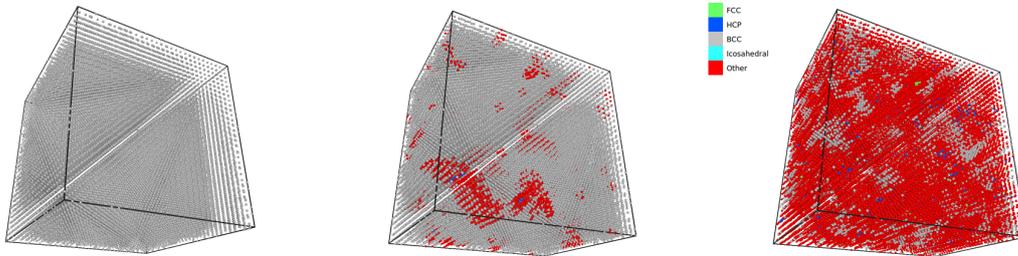


Figura 1.6: Evolución de una estructura BCC a través de CNA.

con tres, cuatro, cinco o seis vértices/aristas. Este vector es característico de cada tipo estructural: por ejemplo, el poliedro de Vonoi correspondiente a la red FCC es equivalente al obtenido mediante un estudio de celdas de Wigner-Seitz y comprende 12 caras de 4 vértices cada una; esto es, el vector para FCC es (0, 12, 0, 0). Para una BCC, el vector es (0, 6, 0, 8). Sin embargo, este método sin mejoras adicionales no es capaz de distinguir entre estructuras FCC y HCP, dado que el vector es el mismo en ambos casos.

- Un análisis de vecinos comunes (*CNA, Common Neighbor Analysis*), que permite caracterizar una cierta muestra de cristal de forma que obtenemos el tipo de estructura presente en su red. Para ello se estudian los vecinos que cada uno de los átomos presentes en esta muestra posee, estableciéndose un parámetro de distancia de corte (*cutoff distance*) que es específico para cada tipo de estructura (Cuadro 1.2).

Comparando el número de átomos vecinos con el correspondiente al *cutoff* específico de la estructura perfecta, puede establecerse a qué tipo de entre BCC, FCC y HCP corresponde, o bien descartar estas tres posibilidades. En la figura 1.6 se incluye un mínimo ejemplo que permite ilustrar cómo, bajo ciertas condiciones de simulación, una estructura perfecta BCC en situación inicial, va evolucionando de manera que en ciertos momentos existen zonas del cristal que cumplen con las condiciones de otros tipos de estructura. Este tipo de estudios permite identificar transformaciones alotrópicas de un material, por ejemplo cómo las que sufre el *Fe*: a bajas temperaturas, presenta estructura BCC, mientras que a altas, cambia a una FCC con la consecuente variación de su volumen.

En realidad, un *CNA* realiza una comparación de diversos valores (el trinomio n_{cn}, n_b, n_{lcb} formado por: el número de átomos vecino que un determinado átomo y otro enlazado tienen en común; el número de enlaces entre vecinos comunes; y el número de enlaces en la cadena más larga de enlaces conectando vecinos comunes), respecto a los teóricamente esperables para cada tipo de estructura (Cuadro 1.3).

- El análisis de vecinos comunes de tipo adaptativo (*a-CNA, Adaptive Common Neighbor Analysis*), es una mejora del método CNA que permite su utilización en sistemas multi-fase en los que no puede definirse un *cutoff* general. Se trata de definir un *cutoff* para cada átomo, e independientemente de con qué tipo de estructura se pretenda comparar.

En este caso, se genera en primer lugar una lista de los N_{max} átomos más cercanos ordenada por distancia (donde N_{max} indica el número máximo de átomos a tener en cuenta, según el tipo de estructura que se

BCC	FCC	HCP
$8 \times (666)$	$12 \times (421)$	$6 \times (421)$
$6 \times (444)$		$6 \times (422)$

Cuadro 1.3: Trinomio n_{cn}, n_b, n_{lcb} para las estructuras comunes.

pretendan distinguir, Cuadro 1.3). La distancia media entre esos N_{max} vecinos permite obtener una escala de longitudes para uso local y, en definitiva, puede obtenerse un *cutoff* local para ese átomo en cuestión y que puede compararse con los diferentes *cutoff* locales de referencia para cada una de las estructuras posibles (FCC, BCC...). Aunque el coste de cálculo es superior al estudio CNA estándar, tan sólo se incrementa en torno a un 25% para las tres estructuras más habituales.

8. Por último, el análisis de distancia entre vecinos (*NDA*, *Neighbor Distance Analysis*) se basa en el cálculo, usando las coordenadas de la partícula, de un identificador que resulta invariante tras ciertas transformaciones y que puede ser fácilmente comparado. A diferencia del *CSP*, no requiere de la preexistencia de ciertas condiciones de simetría o especial ordenación de las partículas.

En este caso, se realiza la comparación entre las distancias entre un determinado átomo y cada uno de sus vecinos (confeccionando y ordenando la lista de éstos), y se compara con los patrones correspondientes a las estructuras teóricas ajustados con un pequeño margen (debido a las posibles perturbaciones de tipo térmico o deformaciones elásticas existentes en la muestra a analizar). El mayor coste computacional de este método hace que sea sólo aconsejable en el caso de que existan estructuras que no hayan sido identificadas mediante otro tipo de análisis más sencillo.

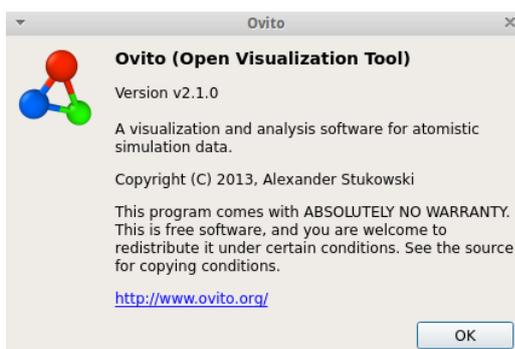
Muchos de estos tipos de análisis están habitualmente implementados en los propios paquetes de simulación, o bien en los programas específicos de visualización, con objeto de ser utilizados para identificar zonas que no cumplen con los requisitos necesarios de las redes perfectas: defectos puntuales, dislocaciones, bordes de grano.

Capítulo 2

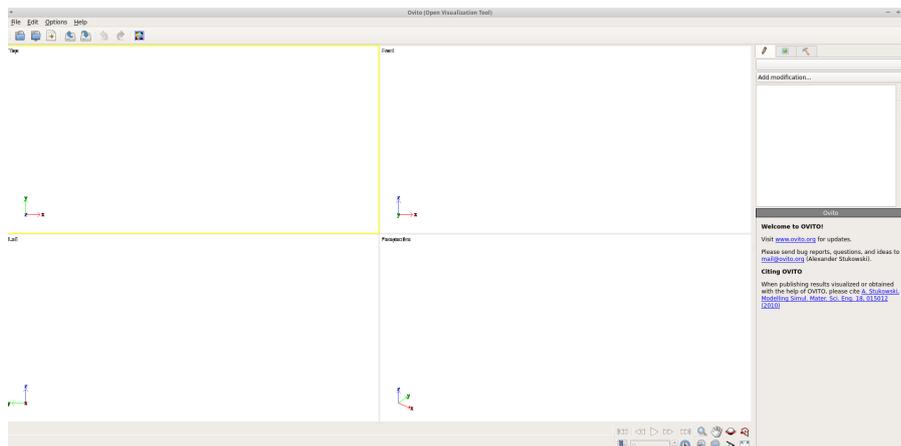
The Open Visualization Tool

2.1. OVITO

The *Open Visualization Tool* (OVITO) es una herramienta de código abierto desarrollada por el investigador Dr. Alexander Stukowski. Su potencialidad reside en la sencillez de manejo y en las diferentes funciones y filtros que permite realizar.



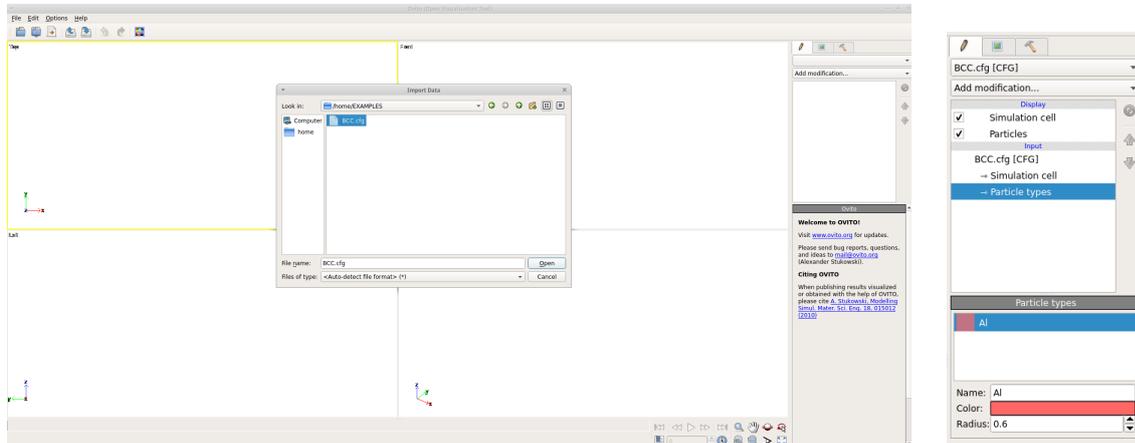
Su descarga puede hacerse de manera gratuita a través de la página oficial de la herramienta (<http://www.ovito.org/>), ofreciendo soporte para diferentes sistemas operativos (Windows, Linux y MacOS). Tras instalarlo, basta con abrir la ventana principal del programa para poder empezar a cargar la información de que dispongamos como salida de un programa de simulación molecular. La pantalla queda repartida en cuatro ventanas gráficas: *top* (vista superior), *front* (vista frontal), *left* (vista lateral izquierda) y *perspective* (vista en perspectiva). No obstante, cada una de estas ventanas puede personalizarse a una vista particular o preferida por el usuario. Basta para ello con pulsar el botón derecho del ratón sobre alguno de los nombres de las ventanas para obtener alguna de las vistas predefinidas en *View type* (right, bottom, ortho,...).



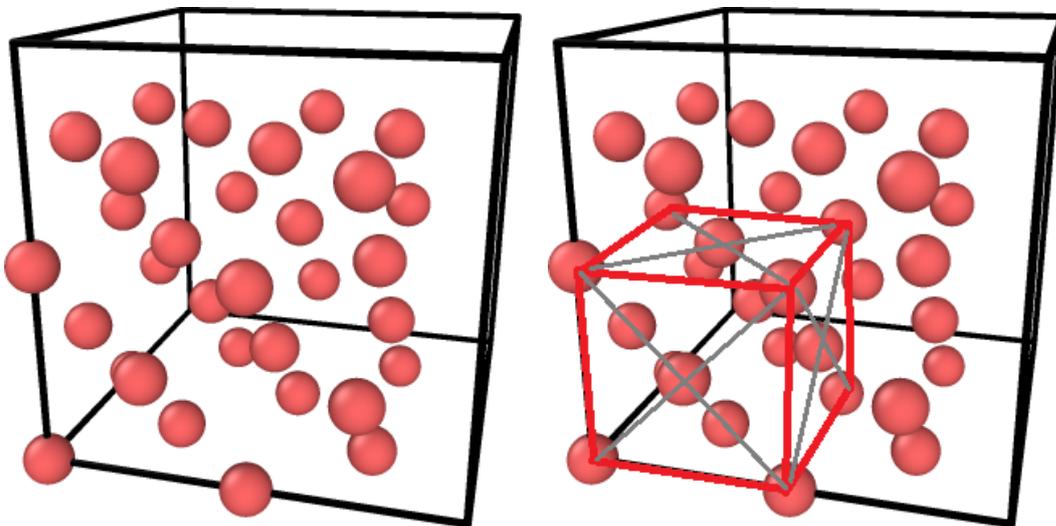
2.2. Estructuras habituales de cristales perfectos

2.2.1. Ejercicio básico: cristal de reducidas dimensiones

Para una explicación práctica de las redes cristalinas, con objeto de que el alumno pueda visualizar la organización espacial de las mismas, procederemos a cargar un archivo básico de coordenadas. Para ello, en la carpeta de trabajo se han dejado previstos varios archivos de entrada. Para cargar un archivo basta con desplegar el menú *File* > *Open local file* y mediante el explorador de archivos buscar en ejemplo que deseemos. En este caso, seleccionaremos el archivo *FCC_Al.cfg*.

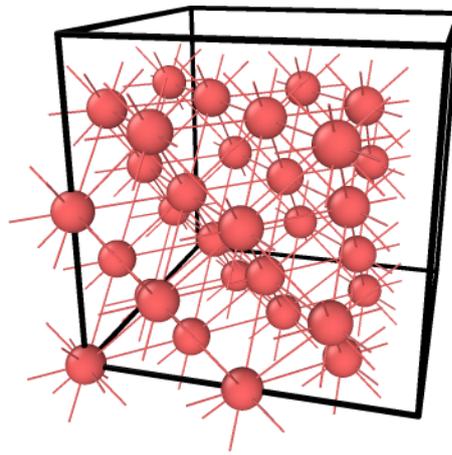


Al cargar, vemos cómo OVITO identifica cada uno de las entradas del archivo como una partícula diferente, presentándola como una esfera independiente del resto. La red cargada cumple con los requisitos de una estructura tipo FCC. Debe de notarse que, debido a la propia configuración habitualmente necesaria en los programas de visualización, los últimos planos de cada dirección no se representan, sino que se supone que se repiten (condiciones de periodicidad).

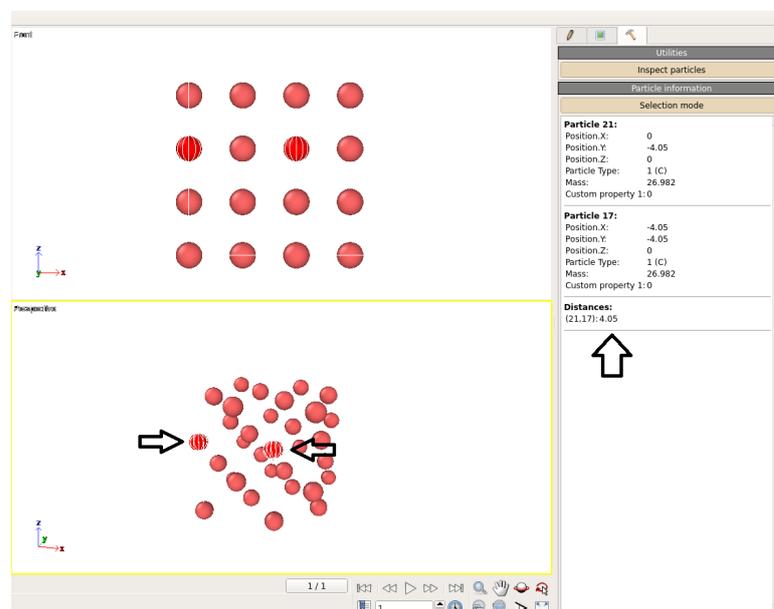


Se trata de un cristal de aluminio, con un parámetro de red de 4.05 ångström (0.405 nm). Para empezar, el alumno puede cambiar algunos parámetros básicos de la visualización. Por ejemplo, por defecto OVITO suele colocar un radio de visualización demasiado grande, que incluso a veces hace que los átomos se superpongan. En el panel derecho, puede seleccionarse el sub-menú *Particle types*, y seleccionando el tipo aluminio (*Al*), puede cambiarse tanto el color como el radio de visualización, por ejemplo un valor de *0.5*. Esta operación también puede realizarse desde *Particles*. En este caso, aparecerán en la parte inferior opciones para cambiar el tipo (normal o plano) y la calidad del renderizado (alta, media, baja calidad o automática), la forma del átomo (esférica o cuadrada), y el radio de las partículas por defecto.

Otra de las opciones sencillas es la representación de los enlaces entre átomos de forma esquemática. Mediante líneas, se representan los segmentos teóricos que unen cada pareja de átomos, y que constituyen las direcciones sobre las que, en su caso, realizará los correspondientes cálculos de ángulos. Para ello basta con entrar en *Add modification* > *Create Bonds*, y automáticamente el programa establecerá estos enlaces.



Para calcular la distancia entre dos partículas, puede activarse el panel correspondiente a las utilidades (🔧), que permite activar el subpanel *Inspect particles*. Si pulsamos sobre las dos partículas que forman la arista superior de la red (para hacer una selección múltiple, y obtener información de varias partículas debemos pulsar simultáneamente la tecla *Ctrl* mientras pulsamos las partículas con el ratón), podemos comprobar que el resultado de la distancia coincide con el correspondiente parámetro de red (como no puede ser de otra forma).



El alumno puede cambiar de ventana activa entre las cuatro posibilidades, recuadrándose en cada caso la seleccionada. La barra colocada en la parte inferior derecha dispone de botones que permiten diversas operaciones para obtener vistas específicas:



- Zoom, mediante el icono “lupa”
- Mover la ventana, mediante el icono “mano”
- Rotar la vista, con el icono “órbita”
- Seleccionar el centro de rotación, con el icono de “flechas”
- Extender el zoom a la escena, a través de icono “lupa con imágenes”
- Hacer zoom a los elementos seleccionados, con el icono “lupa con recuadro”
- Cambiar el ángulo de visión, mediante el icono “ángulo”

- Agrandar o reducir la ventana activa, con el icono “ventana con flechas”

El resto de botones corresponden a funciones sólo aplicables con múltiples escenas y animaciones, como se verá más adelante. El alumno puede ahora aprovechar las mencionadas funciones de visualización para girar o mover alguna de las vistas. Se propone bajar el radio de las esferas hasta 0.35.

2.2.2. Cristal de mayores dimensiones

A continuación, se propone identificar la estructura de un cristal formado por una gran cantidad de átomos. En este caso la identificación directa de la geometría de la estructura no resulta tan sencilla al observar la representación gráfica del mismo. En este caso, el alumno puede cargar otro de los ejemplos propuestos (*FCC_Cu.cfg*) y repetir los pasos anteriores. En este caso, podrá visualizar e identificar un cristal de cobre (*Cu*) con 108000 átomos bajo una estructura tipo FCC, y con un parámetro de red de 3.615 ångström.

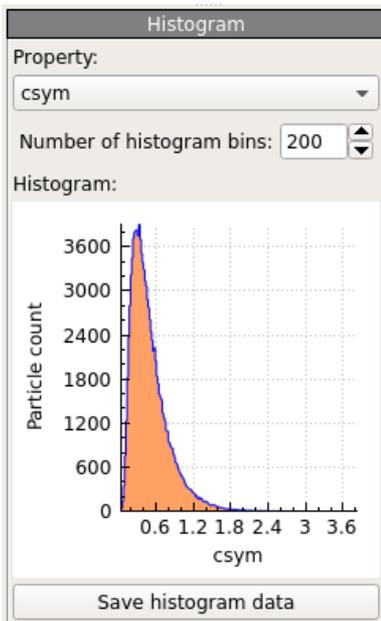
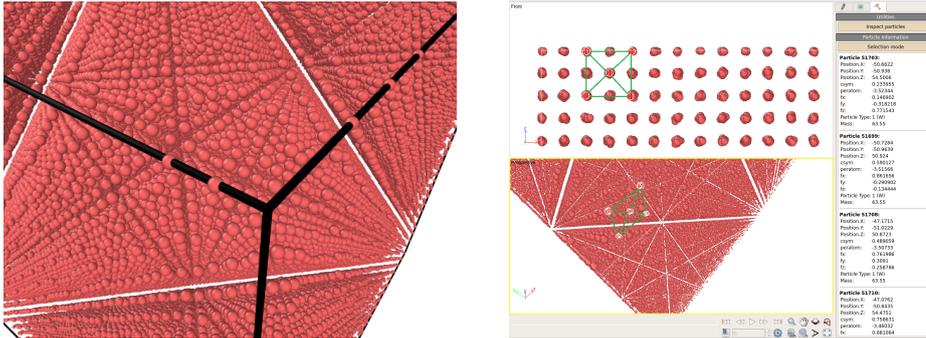


Figura 2.1: Ejemplo de histograma para la variable *csym*.

Si en este caso realizamos un estudio de tipo *CSP* (Centrosymmetry parameter) partiendo de un valor $N=12$, obtendremos que para la mayor parte de las partículas el valor de éste es inferior a 0.8, es decir, que se encuentran en posiciones muy similares a las teóricas correspondientes a una estructura FCC. Para ello, tras solicitar *Add modification...* en el panel derecho, seleccionaremos la casilla *Centrosymmetry parameter*, e indicaremos *Number of neighbors: 12*. Al pulsar Intro, calculará el valor de este parámetro para cada partícula, y lo guardará en una variable que llamará *Centrosymmetry*. Podemos realizar un filtro para ver cuántos átomos cumplen con un valor de esta variable inferior a 1, mediante *Add modification...> Expression select*, e indicando en la caja de *Boolean expression*:

$$\text{Centrosymmetry} < 1$$

OVITO nos proporciona el número de partículas que cumplen con esta condición, respecto al total de las existentes en la caja de visualización (en este caso, un 93%). Esta misma conclusión puede obtenerse con otro de los datos cargados directamente de la simulación (*csym*), en la cual ya habíamos solicitado el cálculo de este mismo valor (desde el propio paquete de simulación atomística). La última versión de OVITO permite además dibujar de forma rápida un histograma incluyendo, por ejemplo, la distribución de la población de átomos en función del valor de esta variable (*csym*). Si dibujamos este caso (Figura 2.1), veremos que el mayor porcentaje de átomos se encuentra en un intervalo con valores del parámetro de centrosimetría inferior a 0.6 (para un valor inicial de $N=12$). Para ello basta con entrar en *Add modification...> Histogram*, y seleccionar en *Property* alguna de estas dos variables (*csym* o *Centrosymmetry*).

Como comprobación adicional, podemos calcular en *Add modification...> Expression select* el número de átomos para los cuales la diferencia entre ambos valores (*Centrosymmetry-csym*) sea inferior a la milésima, por ejemplo:

$$\text{Boolean expression: } \text{Centrosymmetry-csym} < 0.001$$

Podemos comprobar que el 99% de las partículas cumplen con esta condición, es decir, que los cálculos efectuados por OVITO comparados con los heredados del programa de simulación son prácticamente iguales.

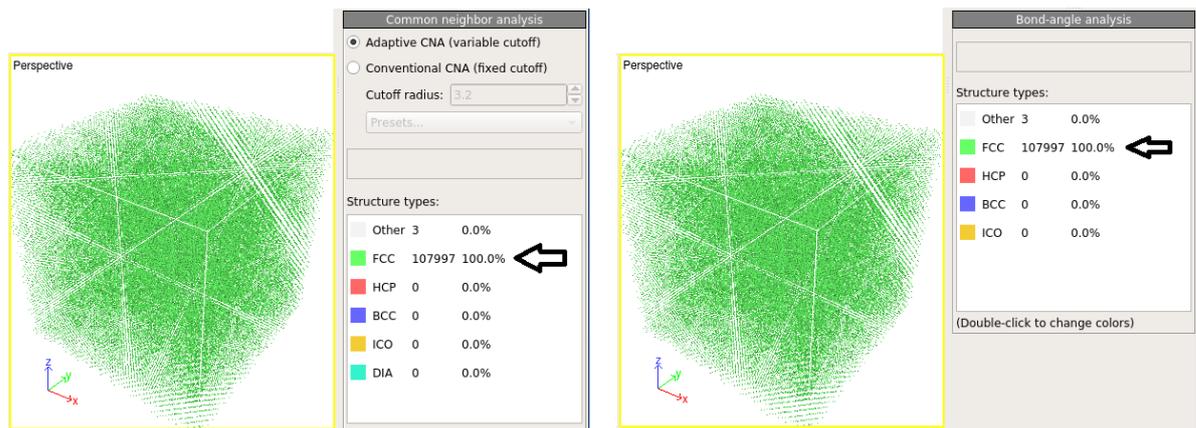


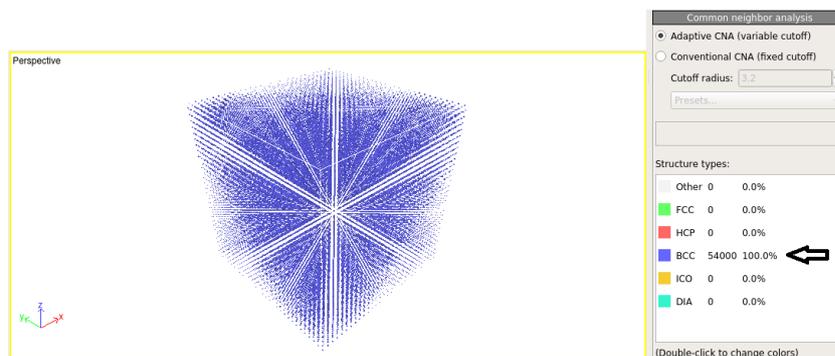
Figura 2.2: Resultados de los estudios tipo *Common neighbor analysis* (CNA) y *Bond-angle analysis*.

Si intentamos este mismo protocolo, es decir el cómputo del parámetro de centrosimetría, pero partiendo de un valor inicial $N=8$, estaremos buscando el porcentaje de átomos que responden a una configuración similar a la BCC teórica (el alumno debe de notar que la diferencia es el valor N de partir para el análisis: 12 es para red FCC, y 8 para red BCC). Se anima al alumno a que realice esta comprobación. En esta ocasión, menos de 1% de los átomos responden a un parámetro de centrosimetría inferior a la unidad, por lo que el cristal en su conjunto no responde a la estructura correspondiente a $N=8$ (BCC).

Si por otro lado realizamos un estudio CNA, OVITO nos coloreará el 100% de los átomos de la caja con el color verde, que según la leyenda corresponde precisamente a la red tipo FCC. Podemos escoger en este momento la realización de un análisis de tipo convencional (para lo cual debemos indicar el radio de corte o *cutoff*, seleccionando el elemento en el desplegable *Presets...*), bien de uno tipo adaptativo que no requiere ningún dato adicional. Idéntico resultado obtenemos con un estudio tipo *Bond-angle analysis* (Figura 2.2).

2.2.3. Autoevaluación

Con objeto de asegurar la adecuada comprensión de los conceptos previamente Se propone al alumno que cargue en este caso el archivo *W.cfg*, y realice pruebas sobre el visualizador. En este caso se trata de un cristal de tungsteno (*W*), con 54000 átomos. El objetivo en cualquier caso es el conocer que tipo de estructura posee este cristal mediante el uso de las técnicas anteriormente explicadas.



2.3. Detección de zonas de defectos

En muchos de las situaciones que un investigador puede imponer durante una simulación, pueden surgir zonas del cristal que no cumplan con una geometría asociada a las redes teóricas. La aparición de defectos puntuales, dislocaciones o los límites de un cristal pueden ser detectados mediante el uso (único o simultáneo) de alguna de las técnicas previamente descritas.

Para lograr que el alumno comprenda la utilidad de estas técnicas, se propone la carga de un nuevo archivo de coordenadas (*Tilt_GB.cfg*). Se trata de un borde de grano de tipo *tilt*, de manera que se representa la zona de encuentro entre dos estructuras cristalinas del mismo material, pero con orientaciones de red enfrentadas con un cierto ángulo de desalineación. Sobre la geometría cargada, el alumno puede solicitar un estudio tipo CNA sobre el total de partículas. Aunque las orientaciones de los cristales son distintas en la parte superior e inferior de la muestra, los resultados muestran como ambas partes poseen una clara estructura tipo FCC.

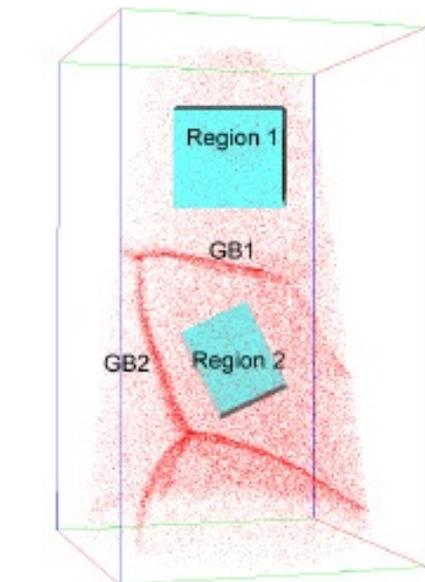
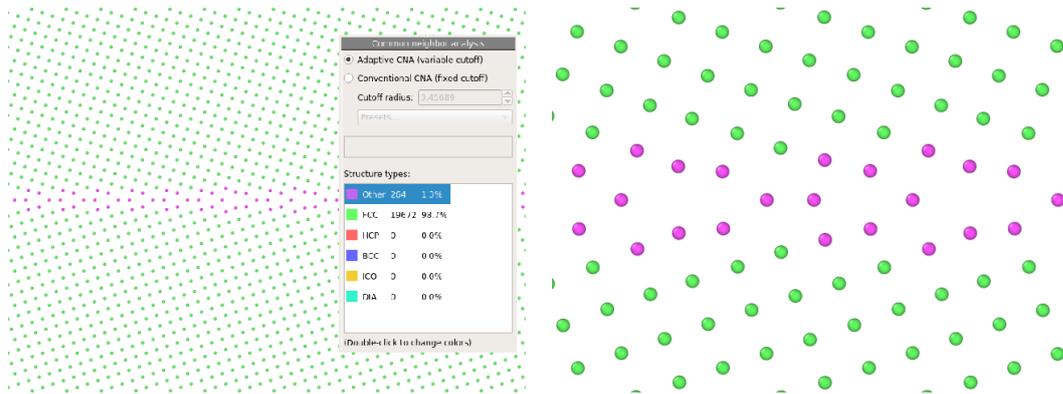


Figura 2.3: Detección de un borde de grano durante la simulación de un hilo superconductor (*M. J. R. Sandim et al, 2013, Supercond. Sci. Technol. 26 055008*)

La parte coloreada como Other podemos encontrarla en tres zonas de la caja total: en los bordes superior e inferior (que son contornos de la simulación), y en la zona central (precisamente en la frontera entre ambos cristales definidos, es decir, un borde de grano). La parte central ha quedado nítidamente excluida de las estructuras tipo FCC que sí se han coloreado para los núcleos de los cristales superior e inferior.

El resultado obtenido mediante un estudio Bond-angle matiza los límites del borde de grano, pero interpreta que alguno de los átomos están orientados según configuración BCC.

Este tipo de operaciones permite detectar zonas en las que no se cumplen las condiciones de geometría correspondientes a una estructura de red teórica. por ejemplo, son utilizados para observar la formación de dislocaciones en simulaciones de deformación o impacto, o para definir los bordes de grano en simulaciones de policristales de mayor complejidad (Figura 2.3).

2.4. Renderización de imágenes y vídeos

Otra de las posibilidades visuales de OVITO es su facilidad para generar imágenes renderizadas y construir vídeos a partir de secuencias de simulación. Esto resulta interesante cuando se pretende analizar la evolución temporal de una muestra durante la simulación bajo ciertas condiciones de ensayo. Por ejemplo, la formación y evolución de defectos en pruebas mecánicas, cambios en la forma de los bordes de grano, o el movimiento de defectos puntuales y su crecimiento o degeneración.

Debe de tenerse en cuenta que OVITO permite no sólo cargar un único paso de tiempo, es decir, un único fichero de coordenadas. Desde el momento de carga, el programa detecta si existe una secuencia de archivos ordenados mediante un contador secuencial (que no es otro que la evolución temporal de los pasos de tiempo que se han almacenado durante la simulación).

Así, una vez cargados, OVITO permite avanzar en el tiempo como si se tratara de una película de animación presentando las diferentes instantáneas guardadas.

Pero además, el visualizador está diseñado para que los filtros o tipos de análisis solicitados se realicen para todas y cada una de las instantáneas guardadas. Por ejemplo, podemos ver un estudio *CNA* en un determinado paso de tiempo, pero luego avanzar en el tiempo y estudiar si la situación es estable o si por el contrario hay cambios en alguno de los tipos de red inicialmente detectados en el análisis.

Un buen ejemplo es la formación y movimiento de las dislocaciones. Para una mejor comprensión, se propone a los alumnos realizar la carga de la secuencia de archivos proporcionada en la documentación del curso (*Video_input.zip*). Al descomprimir la carpeta, encontramos una serie de archivos *dump.tensile_*.cfg*.

Cada uno de ellos contiene las coordenadas de las partículas correspondientes a una secuencia de un ensayo de compresión en aluminio realizado mediante Dinámica Molecular.

Al cargar desde OVITO el archivo *dump.tensile_0.cfg*, el programa detecta la existencia de una serie secuencial que llega hasta *dump.tensile_20000.cfg*. Una vez abierto el archivo, podemos ver la evolución del ensayo en el tiempo haciendo avanzar la barra de tiempo que aparece en la parte inferior de las ventanas gráficas. Los botones de las flechas del visualizador cobran ahora sentido real, con una funcionalidad similar a la de un reproductor de música o vídeo.

Como ejemplo, podemos realizar un estudio tipo *CNA* y comprobar así la aparición de zonas que dejan de cumplir las condiciones de la red inicial del aluminio (FCC). Al ejercer una compresión y obligar a cristal a deformarse con una velocidad constante llegaremos a un momento en el que comenzarán a aparecer dislocaciones, esto es, zonas de deformación plástica no recuperable en las que alguno de los átomos se ha desplazado de su posición inicial hasta otra adyacente. El estudio *CNA* es capaz de indicarnos cuáles de los átomos han pasado por esa fase de dislocación, así cómo estas dislocaciones avanzan y aumentan con el tiempo.

Se propone al alumno realizar este tipo de análisis y comprobar la evolución temporal. Si en cualquiera de los instantes de tiempo nos interesara captar una instantánea de la situación en ese punto (en un momento donde se aprecia con mayor claridad el suceso que se pretende ilustrar de cara a una publicación o con fines docentes), podemos solicitar una imagen renderizada de cualquiera de las ventanas gráficas.

Activaremos la ventana gráfica, y pulsaremos sobre el icono . Se abrirá en este momento el panel de opciones de renderización (Figura 2.4).

En el panel podemos escoger renderizar, en primer lugar, una sola imagen (*Single frame*). En *Output image size* podemos cambiar el tamaño de la imagen, en anchura y altura. También puede escogerse el color de fondo de la instantánea (*Background color*), el tipo de renderizador (*Change renderer...*), y por último el nombre y ubicación del archivo de salida, en diferentes formatos (*Save to file/ Choose...*).

Pero si lo que se pretende es obtener un video de una determinada secuencia de tiempo, podemos escoger entre la animación completa (*Complete animation*) y un rango de tiempos en la secuencia (*Range*). Para el caso de animaciones, además, puede escogerse el salto de tiempo que solicitas a OVITO que utilice para formar la película, así como el número con el que queremos nos nombre al primero de los archivos de salida (*File number base*).

En este caso, cuando seleccionamos el archivo de salida (*Save file/ Choose...*) podemos indicarle un formato de imagen (de manera que obtendremos tantas imágenes renderizadas, con el tamaño y colores indicados, según el rango de tiempos y el salto que le indiquemos, y además nombradas secuencialmente desde el número aportado en *File number base*).

Si por el contrario, indicamos a OVITO un formato de video entre los que nos permite, únicamente generará un archivo de tipo película o animación, que podremos utilizar igualmente en presentaciones científicas, docencia, o páginas web.

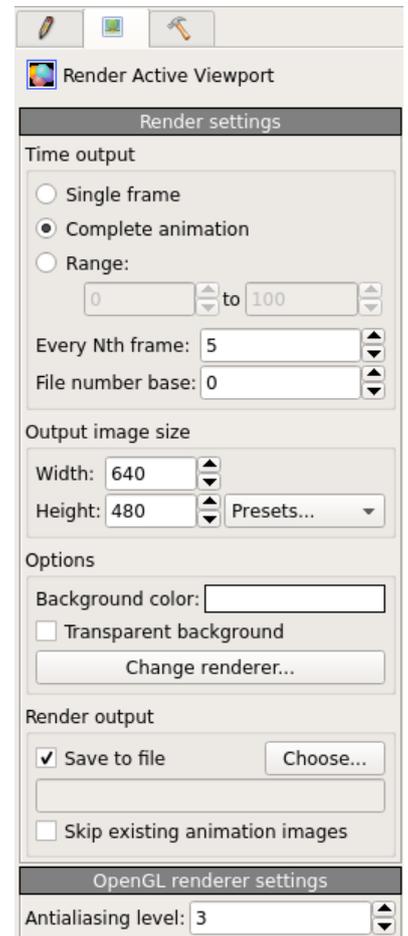


Figura 2.4: Panel de renderización.