

Índice general

1. Introducción	1
2. Defectos lineales: Dislocaciones	4
2.1. Estructuras cristalinas	4
2.2. Concepto de dislocación	7
2.3. Dinámica de las dislocaciones	8
2.4. Análisis y visualización de los datos	10
3. Método cuasicontinuo	13
3.1. Minimización condicionada de la energía	15
3.2. Grupos de átomos	16
3.3. Mallado adaptativo	18
3.4. Evaluación de los errores	18
4. El método cuasicontinuo a temperatura finita	20
4.1. El principio de máxima entropía	21
4.1.1. Formulación general	22
4.1.2. Teoría variacional del campo medio	23

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	II
4.1.3. Distribución local de máxima entropía	24
4.1.4. Potenciales termodinámicos	26
4.1.5. Interpretación de los parámetros del campo medio	28
4.2. El método QC a temperatura finita	29
4.2.1. El método QC a temperatura constante	30
4.2.2. Formulación de los problemas termomecánicos	31
4.2.3. Método cuasicontinuo y transporte de calor	34
5. Potenciales atómicos	38
5.1. Potencial tipo Lennard-Jones	39
5.2. Potenciales basados en el método del átomo embebido (Embedded-atom method)	41
6. Programación del método	45
6.1. Definición del problema	45
6.2. Expansión térmica	46
6.3. Deformación del cristal	47
7. Modelado para materiales con estructura BCC	49
7.1. Estructura cúbica centrada en el cuerpo	49
7.2. Potencial tipo Finnis-Sinclair	51
8. Ejemplo numérico	54
8.1. Definición del problema	54
8.2. Adimensionalización de los parámetros del material	55

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	III
8.3. Resultados	56
9. Conclusiones y desarrollos futuros	62
A. Funcionamiento del programa	65
B. Parámetros de ajuste del potencial Finnis-Sinclair	74
C. Programación del potencial	76
C.1. Interacción entre átomos	76
C.2. Interacciones relativas a la densidad	79
D. Bibliografía	82

Índice de figuras

2.1. Cristal	5
2.2. Estructuras cristalinas cúbicas.	5
2.3. Tipos de dislocaciones	7
2.4. Circuito de Burgers	8
2.5. Movimiento de las dislocaciones	9
2.6. Movimiento mediante fluctuaciones térmicas	10
2.7. Histograma de la energía local	11
2.8. Histograma del parámetro CSD y representación atómica de los defectos alrededor de un microhueco basada en dicho parámetro	12
3.1. Ejemplo de triangulación del cristal	15
3.2. Grupos de átomos en la triangulación del cristal	17
5.1. Potencial de Lennard-Jones adimensionalizado (I)	40
5.2. Potencial de Lennard-Jones adimensionalizado (II)	41
5.3. Embedded-atom method adimensionalizado para el cobre (I)	43
5.4. Embedded-atom method adimensionalizado para el cobre (II)	43
5.5. Embedded-atom method adimensionalizado para el cobre (III)	44

7.1. Potencial de Finnis-Sinclair-I	52
7.2. Potencial de Finnis-Sinclair-II	53
8.1. Mallado inicial en probeta de Vanadio con un nanohueco en su interior	55
8.2. Evolución de la malla en el plano de corte $z = 0$ de en probeta de Vanadio con un nanohueco en su interior	58
8.3. Evolución de la temperatura en el plano de corte $z = 0$ en probeta de Vanadio con un nanohueco en su interior	60
8.4. Campo de desplazamiento (dirección z) en el plano de corte $z = 0$ en probeta de Cobre con un nanohueco en su interior	61