

# Capítulo 1

## Introducción

Entender la respuesta mecánica de los materiales ante sollicitaciones dinámicas requiere el conocimiento de las propiedades físicas, mecánicas y termodinámicas de dichos materiales en el rango de deformación apropiado. Actualmente, las capacidades de los ordenadores permiten que los nuevos estudios sean capaces de predecir computacionalmente dichas propiedades sin hacer a priori ninguna o casi ninguna suposición. Estos métodos, entre los que se encuentran los multiescala, se han utilizado con éxito en numerosos sistemas de relativa sencillez prediciendo multitud de propiedades de los materiales como, por ejemplo, el magnetismo y las transiciones de fase, entre otras.

Sin embargo, la complejidad de los materiales ingenieriles ha aumentado con el tiempo y entender su respuesta en ambientes extremos se ha convertido en una clave para diseñarlos. La interacción entre fases que se puede dar, por ejemplo, en huecos o burbujas en el interior del material, puede ser compleja y provocar respuestas inesperadas, sobre todo, en periodos de carga. Por esto, en estos casos, es importante entender de forma certera los procesos de deformación.

Una forma de conocer los mecanismos bajo los que se deforman estos materiales es mediante simulación numérica. La escala del problema sugiere utilizar como herramienta Dinámica Molecular (DM), ésta ha sido utilizada para descubrir, entre otras propiedades, que los nanohuecos que exceden una presión y temperatura (que dependen del tamaño crítico) crecen mediante la emisión de dislocaciones y la coalescencia con huecos cercanos. Además, DM es una herramienta bastante apropiada para estudiar el crecimiento de huecos con altas deformaciones, normalmente mayores que las obtenidas experimentalmente. Sin embargo, la introducción de un hueco requiere el uso de grandes sistemas y condiciones de contorno apropiadas, ya que la plastificación se localiza en sus alrededores; en este caso, implementar DM como herramienta de análisis puede introducir artificios indeseados y que el coste computacional sea demasiado alto.

Con estas condiciones, el método cuasicontinuo (QC) es una alternativa viable a los métodos atomísticos, ya que permite el tratamiento de grandes sistemas de forma eficiente, resolviendo las áreas no lineales con resolución atomística. A pesar de ser un método cuasiestático, por lo que solo puede calcular la configuración de los nodos en equilibrio, ha permitido el estudio de los procesos de deformación asociados con el colapso del hueco o de los mecanismos de deformación en un proceso de nanoindentación, al igual que la investigación de numerosos fenómenos mecánicos en los que el método QC se ha aplicado con éxito.

El método fue originalmente desarrollado por Tadmor como parte de sus estudios de doctorado en la Universidad de Brown bajo la supervisión de M.Ortiz y de R.Phillips. Se aplicó a metales con estructura monocristalina cúbica centrada en las caras (fcc) para investigar la mecánica de redes en una gran variedad de defectos de línea y de superficie ([23], [24]), además de la nanoindentación en láminas finas [25]. Posteriormente, en la misma universidad Shenoy generalizó el método y permitió extenderlo para tratar materiales policristalinos [18]. Gracias a esto, pudo estudiar numerosos problemas, incluyendo la interacción de las dislocaciones con los bordes de grano y los mecanismos de paso sobre los bordes de granos [19]. R.Miller continuó el trabajo al extender el método cuasicontinuo para estudiar la fractura mecánica a nivel atómico considerando los efectos de la orientación de los granos y la interacción entre la grieta y los bordes de grano ([16], [17]).

En los últimos años ha continuado el desarrollo del método en diferentes grupos. Tadmor en el Departamento de Ingeniería Mecánica en Technion (Israel) en colaboración con el grupo de Efthimios Kaxiras en la Universidad de Harvard extendió el método para tratar materiales con redes cristalinas complejas [26] usándolo para estudiar nanoindentación en cristales monocristalinos de silicón ([21], [22]) y los mecanismos de polarización en materiales ferroeléctricos. M.Ortiz desde los Laboratorios de Aeronáutica en Caltech y J.Knap han introducido una versión tridimensional y no local del método cuasicontinuo [10] usada para estudiar nanoindentación; además M.Ortiz colabora con E.Carter en UCLA para sustituir los potenciales interatómicos por métodos *ab initio*. Miller en el Departamento de Mecánica e Ingeniería Aeroespacial en la Universidad de Carleton en Canadá en colaboración con B.Curtin en la Universidad de Brown están desarrollando una técnica para extraer las dislocaciones de las regiones no locales y representarlas por su campo elástico en las regiones locales.

La temperatura juega un papel importante en muchos fenómenos físicos, por esto, se han propuesto diferentes formas para incluirla en el método cuasicontinuo. El trabajo de Shenoy et al. [20] se basa en derivar la energía libre del sistema incorporando los grados de libertad restringidos usando la distribución canónica; dicho trabajo se ha usado para estudiar la dependencia de la temperatura de las estructuras de las dislocaciones en Aluminio. Otro método ha sido propuesto por Wu et al. [28], en él se define una función de partición que solo depende de los átomos representativos basada en la colectividad canónica. Dupuy et al. [5] han desarrollado un método en el que integran DM (Dinámica Molecular) en la estructura del cuasicontinuo para estudiar la dependencia de la temperatura en nanoindentación en Aluminio; la idea básica es obtener un potencial efectivo integrando los grados de libertad restringidos. La principal limitación de todos estos métodos es que solo han sido desarrollados para problemas en

equilibrio a temperatura constante. Debido a esto, Y.Kulkarni, como parte de su investigación del doctorado en Caltech, ha desarrollado [11] una forma de añadir los efectos de la temperatura a la versión tridimensional y no local del método cuasicontinuo desarrollada por M.Ortiz y J.Knap.

En este proyecto, partiendo de esta última versión y con el objetivo de comparar los resultados previos obtenidos a temperatura 0 ([13], [14], [15]), se va a implementar el potencial de Finnis-Sinclair para simular un nanohuevo en una material con estructura cúbica centrada en el cuerpo (se parte de un programa que permite simular un nanohuevo en una estructura cúbica centrada en las caras con potenciales del tipo embedded-atom y Lennard-Jones). Con este nuevo potencial se pretende estudiar los mecanismos de deformación en los alrededores del nanohuevo durante procesos de carga y descarga, y las microestructuras resultantes, también se pretende determinar el comportamiento macroscópico calculando las curvas de tensión-deformación y los cambios de volumen respecto a la deformación.

El trabajo se estructura como sigue: en el capítulo 2 se hace una pequeña introducción de la redes cristalinas y de las dislocaciones para entender los mecanismos mediante los cuales los materiales se deforman y la influencia de la temperatura en ellos. En el capítulo 3 se introducen las claves del método cuasicontinuo a temperatura 0 y en el capítulo 4 se desarrolla la formulación del método a temperatura finita. En el capítulo 5 se explica brevemente la función de los potenciales interatómicos y se presentan los que están implementados en el programa (Lennard-Jones y embedded-atom method). En el capítulo 6 se explica cómo funciona el programa cuando se simula un nanohuevo en un material con estructura FCC y en el capítulo 7 se explican los cambios que se han tenido que introducir para que el programa funcione con el potencial de Finnis-Sinclair en materiales que tengan una estructura BCC. En el capítulo 8 se explican los resultados obtenidos tras realizar una simulación del proceso de deformación de una probeta cúbica de Vanadio con un nanohuevo en su interior. Por último, en el capítulo 9 se resumen los logros alcanzados con este trabajo y se presentan diferentes líneas futuras de investigación.