

Capítulo 9

Conclusiones y desarrollos futuros

Antes de concluir, destacaremos los logros alcanzados en este trabajo y se discutirán diferentes líneas de investigaciones para seguir explorando en un futuro.

El comportamiento de los materiales ante sollicitaciones dinámicas es de gran importancia a la hora de desarrollar nuevos materiales y de entender los límites de los que existen actualmente. En este comportamiento, las dislocaciones juegan un papel esencial y su influencia va desde la definición de la capacidad del cristal de deformarse bajo presión hasta el control de la fatiga, ductilidad, fragilidad, endurecimiento... Como se explicó en el Capítulo 2, la tensión y la temperatura son las variables que permiten la nucleación y el movimiento de las dislocaciones. Por esto, era de gran importancia la aparición de una variante del método cuasicontinuo que permitiera considerar la temperatura en la simulación, por ejemplo, del proceso de deformación de un material con un nanohueco en su interior o en un proceso de nanoindentación.

La inclusión de la temperatura en el método se logra obteniendo los potenciales termodinámicos de forma sistemática a partir de promedios del movimiento térmico de los átomos mediante el teorema de máxima entropía. Esta aproximación permite la homogeneización de la escala temporal, facilitando la simulación de procesos cuasiestáticos y de sistemas en equilibrio termodinámico. La principal ventaja sobre modelos atomísticos, como MD (dinámica molecular), yace en la reducción de los grados de libertad del sistema, a pesar de que todas las condicionantes que influyen en el comportamiento de los átomos son puramente atomísticas. Además, al ser un método multiescala que no trata de forma diferencial a la zona atómica, no existe ninguna superficie que requiera de artificios adicionales o de especial tratamiento del contorno. La extensión del método permite estudiar procesos termodinámicos sin equilibrio simulando la evolución de la microestructura del material en problemas termomecánicos. Además, la flexibilidad en la elección de la velocidad de deformación supone otra gran ventaja, ya que permite simular procesos que pueden ser desde muy lentos o isoterms hasta muy rápidos o adiabáticos.

Por todo esto, y con el objetivo de ampliar el campo de aplicación, el programa se ha extendido para poder simular los metales de transición que presentan una estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo. Este cambio implica, además, la utilización de un nuevo potencial atómico (Finnis-Sinclair) que se adapte a dichos materiales. Dicho potencial, cuyos parámetros se ajustan experimentalmente, está compuesto por una parte atractiva y una repulsiva; como se explicó en el Capítulo 7, se han introducido distintas modificaciones necesarias para mejorar la eficiencia o para recoger aspectos, como la alta repulsión entre átomos existentes a distancias pequeñas, que, por su carácter experimental, el potencial no tiene en cuenta.

Con el ejemplo numérico realizado, queda constatado que el método es una herramienta útil que permite analizar la evolución de la microestructura de un material alrededor de un nanohueco y, más específicamente, el proceso de nucleación y evolución de las dislocaciones. Sin embargo, también hay que hacer constar las limitaciones actuales respecto al tamaño de la caja y el grado de deformación producido en el material. Esto se puede deber a la falta de la convergencia del proceso de minimización de la energía del sistema y, por lo tanto, a la hora de encontrar la configuración de equilibrio. La variante Polak-Ribiere del método de los gradientes conjugados es un método de minimización de sistemas de ecuaciones no lineales cuyo funcionamiento es correcto en funciones relativamente convexas. Sin embargo, la energía en los materiales cristalinos se caracterizan por su falta de convexidad. Dichas limitaciones aparecen en todos los metales sin importar el tipo de estructura que tenga (cúbica centrada en el cuerpo o en las caras), sin embargo, en los primeros las limitaciones se acentúan. Es posible que se deba a que el potencial Finnis-Sinclair involucra a un mayor número de átomos que el embedded-atom method (EAM), lo que provoca que la dificultad de la función de energía global del sistema sea mayor.

Por ello, en investigaciones futuras se desea implementar un nuevo método de minimización para así poder estudiar los fenómenos de nucleación y de emisión de dislocaciones alrededor del hueco con tamaños y niveles de deformación mayores. El objetivo es poder comparar los resultados que se obtengan con los publicados a temperatura 0 ([13], [14], [15]). El primer paso a seguir, sería construir las curvas tensión-deformación y aumento del volumen del hueco-deformación e identificar las diferentes etapas que se observan y los puntos de inflexión que las separan. La deformación se calcula a través de las fuerzas externas y la deformación mediante la deformación axial. En cada una de estas etapas habría que estudiar la microestructura que se forma alrededor del hueco debido a la emisión de dislocaciones y los mecanismos por las que se forman. También, tras el proceso de descarga habría que estudiar la estructura residual y el tamaño del hueco que se obtienen. Por otra parte, se desea estudiar la influencia de la temperatura y de la velocidad de deformación en las curvas anteriormente citadas y, por lo tanto, en el momento de aparición de los puntos de inflexión; para así comprobar cómo cambian los mecanismos de nucleación y de formación de dislocaciones.

Por último, para mejorar la eficiencia de las investigaciones futuras es necesario simular el método en un cluster con mayor capacidad computacional. Para ello es necesario cambiar la forma en la que está programado el método, ya que estos nuevos clusters funcionan con distinta arquitectura de computación: mientras que el programa está preparado para funcionar

en memoria compartida (el procesador tiene acceso a toda la memoria), los clusters funcionan con memoria distribuida (los sistemas tienen su propia memoria local y los procesadores solo pueden compartir información enviando mensajes).