

Índice general

1	Introducción	4
1.1	Necesidad de métodos multiescala	4
1.2	Motivación del problema de la nanoindentación	6
2	El Método Cuasi-Continuo a temperatura finita	9
2.1	Método de Máxima Entropía	9
2.2	Potenciales termodinámicos	12
2.3	Promedio de fase por cuadraturas de Gauss	15
2.4	Interpretación de los parámetros ω_a y σ_a	16
2.5	Bases del Método QC	18
2.6	Extensión del QC al desequilibrio termodinámico	23
2.7	Formulación variacional para problemas termomecánicos	24
2.7.1	Formulación variacional	25
2.7.2	Formulación incremental	26
3	Descripción del modelo de cálculo	28
3.1	Resolución numérica de sistemas de ecuaciones	28

3.1.1	Gradiente conjugado no lineal	29
3.1.2	Relajación Dinámica	32
3.2	Potenciales interatómicos	35
3.3	Automatización indentador esférico	36
3.4	Indentador tipo Berkovich	38
4	Nanoindentación de cristales a temperatura finita	41
4.1	Argón	44
4.2	Cobre	50
4.3	Aluminio	59
5	Conclusiones y trabajos futuros	65
A	Potenciales atómicos	67
A.1	Potencial de Lennard-Jones	67
A.2	Potencial del Método del Átomo Embebido	69
	Bibliografía	72