

Capítulo 1

Introducción

1.1 Necesidad de métodos multiescala

La teoría clásica de mecánica de medios continuos proporciona las bases para la mayoría de herramientas teóricas y computacionales de la ingeniería, sentando la base para el método de los elementos finitos, métodos de volúmenes finitos o métodos de diferencias finitas. A partir de la década de los ochenta, científicos e ingenieros empezaron a incluir descripciones atomísticas en los modelos de fallo y plasticidad de los materiales. Por ejemplo, en la primera etapa del cálculo plástico computacional, dislocaciones y grietas fueron tratadas usando la teoría clásica de mecánica de medios continuos. Durante las últimas décadas, se han desarrollado nuevos modelos del comportamiento a nivel atomístico, se necesita saber como fallan los materiales, por lo tanto, se inicia una gran oportunidad para estudiar la deformación y el fallo de materiales.

El motivo de incluir mecanismos atomísticos es también debido a la tendencia a la miniaturización. La longitud de relevancia en materiales se enfoca en varios nanómetros en la tecnología actual como láminas finas, semiconductores y nanotubos. Una vez la dimensión característica del material disminuye del micrómetro, la teoría clásica de mecánica de medios continuos es cuestionable y la información atómistica completa del estado del material es a menudo necesaria para estudiar estos fenómenos. Además de la importancia de la deformación a nivel atómistico los ingenieros ahora pueden también diseñar materiales a escala nanométrica. La habilidad de diseñar nanoestructuras ha alcanzado un nivel de perfección que ahora nos permite hacer la mayoría de estructuras arbitrarias y formas en escalas muy reducidas, a través de diversas técnicas.

Esta habilidad inicia una nueva era en el diseño de materiales, de abajo hacia arriba, posibilitando nuevas funciones, propiedades y comportamientos para una gran variedad de aplicaciones, como se puede observar en la fig. (1.1). Sin embargo, estos avances también

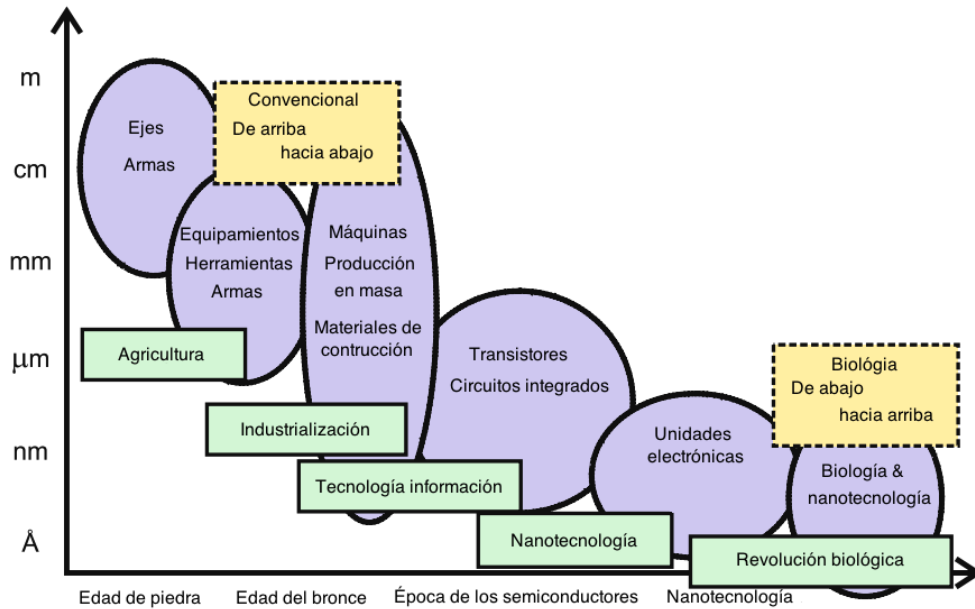


Figura 1.1: Evolución de la escala característica del material a lo largo de la historia

requieren nuevos conceptos teóricos para describir el comportamiento de los materiales, ya que puede ser bastante diferente respecto al modelo tradicional, en los modelos atómicos a menudo se capturan estos y otros efectos.

Asumiendo un punto de vista atómico, tiene otro aspecto bastante importante, se unen distintas disciplinas científicas, en particular, en el estudio de la deformación y la fractura. La causa es el concepto de enlace químico que está vinculado a muchas disciplinas. En este sentido, la química es el lenguaje fundamental de la ciencia de los materiales y de las disciplinas relacionadas. Los modelos atomísticos contienen un extremado número de grados de libertad aunque la dimensión física sea bastante pequeña. Por ejemplo, un cristal de dimensiones de varios micrómetros, puede contener varias decenas de billones de átomos.

Desde el punto de vista continuo, los materiales se tratan sin considerar su microestructura heterogénea subyacente y se asume que la materia puede ser dividida indefinidamente sin cambios en las propiedades del material. Las simulaciones requieren una solución numérica de las ecuaciones en derivadas parciales que gobiernan el material, como métodos de diferencias finitas, elementos de contorno o elementos finitos. Los métodos numéricos usados para resolver problemas continuos requieren la discretización del dominio. Donde haya una mayor densidad de nodos se obtendrá una solución más exacta que donde haya menor densidad de nodos y deberán ser usados allá donde tengamos un gradiente de tensión y deformación mayor.

En modelos atomísticos, la discretización de la materia, en último término es la escala atómica explícitamente considerada, como se puede ver en la fig. (1.2). Por ejemplo, la discretización de una red de un metal con estructura cristalina donde los átomos están

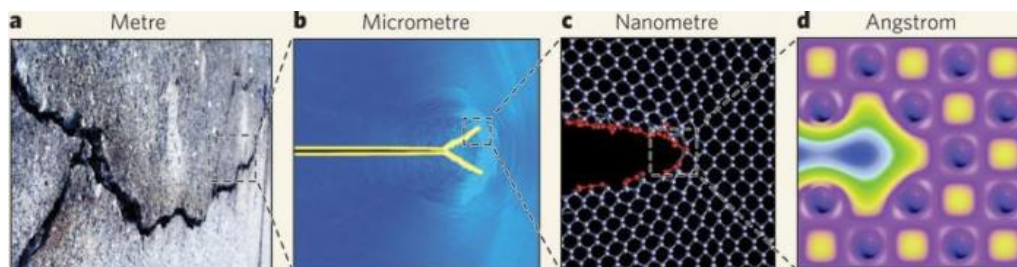


Figura 1.2: En la imagen se muestran las diferentes escalas a las que podemos considerar el material desde nivel macroscópico reduciendo el nivel hasta la observación a nivel atómico: a) m b) μm c) nm d) Angstrom

dispuestos en su posición de equilibrio. Cada átomo es considerado como una partícula individual que no puede ser dividida. Los modelos atomísticos pueden ser raramente resueltos analíticamente, por lo tanto, la mayoría de modelos están implementados con simulaciones numéricas que modelan el movimiento de cada átomo durante el curso de la simulación en un periodo lapso de tiempo. La simulación se lleva a cabo paso a paso integrando sucesivamente la escala de tiempo durante el estudio. El comportamiento colectivo de los átomos nos permite comprender como el material es deformado y se observan los cambios de fase o se investigan otros fenómenos. La observación de fenómenos en muestras con gran cantidad de átomos proporciona la conexión entre escala atómica y escala microscópica o macroscópica. Sin embargo, la información básica de las simulaciones atomísticas son posiciones, velocidades y fuerzas, por lo tanto, la interpretación de las mismas puede ser compleja.

1.2 Motivación del problema de la nanoindentación

En contraposición a otro tipo de simulaciones que se pueden realizar con este método, tenemos que la nanoindentación tiene la posibilidad de realizarse experimentalmente, podemos tener una muestra real del material deseado y aplicar un nanoindentador. Esto no es posible en otros casos, por ejemplo, como cuando se estudian nanohuecos o grietas.

La escala del problema sugiere utilizar como herramienta computacional la Dinámica Molecular (DM) (Rapaport, 1995), herramienta que ha sido utilizada para el estudio del crecimiento de nanohuecos y nanoindentación. Además, DM es una herramienta apropiada para estudiar la nanoindentación con altas deformaciones. Sin embargo, éste método requiere el uso de grandes sistemas y condiciones de contorno apropiadas, ya que la plastificación se produce 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, ya que permite el tratamiento de grandes sistemas de forma eficiente, resolviendo las zonas de interés con resolución atomística. A pesar de ser un método cuasiestático, por lo que sólo se puede calcular la configuración de los nodos en equilibrio, ha permitido el estudio de procesos de nanoindentación, al igual que la investigación de numerosos fenómenos mecánicos en los que el método QC se ha aplicado con éxito.

Otra de las ventajas del método QC es relativa a la velocidad del proceso de deformación. Si observamos los órdenes de magnitud espacial ($\delta \simeq 10^{-11}m$) y temporal ($\Delta t \simeq 10^{-15}s$) en MD, se concluye que la velocidad a la que se produce la deformación en DM es del orden de $10^4 m/s$, velocidad demasiado alta. Este es uno de los motivos por el que se justifica el uso del Método Cuasicontinuo, donde podremos modificar la velocidad, reduciéndola. Además, gracias a la Formulación Variacional, podremos introducir el acoplamiento entre la temperatura y deformación.

El mencionado método QC fue originalmente desarrollado por Tadmor, Ortiz y Phillips (1996) como parte de sus estudios de doctorado en la Universidad de Brown bajo la supervisión de M. Ortiz y R. Phillips. Se aplicó en 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, así como en nanoindentación de láminas finas. Posteriormente, en la misma universidad, Shenoy generalizó el método y permitió extenderlo para el tratamiento de materiales policristalinos. 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 grano. R. Miller continuó el trabajo al extender el método para estudiar la mecánica de la fractura a nivel atómico considerando los efectos de la orientación de los granos y la interacción entre la grieta y los bordes de grano.

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. M. Ortiz desde los Laboratorios de Aeronáutica en Caltech y J. Knap han introducido una versión tridimensional y no local del método (Knap y Ortiz, 2001) usada para estudiar nanoindentación.

La temperatura resulta fundamental en el estudio de muchos fenómenos físicos, por esto, se han propuesto diferentes formas para incluirla en el método. El trabajo de Shenoy y Phillips (1999) se basa en derivar la energía libre del sistema incorporando los grados de libertad restringidos usando la distribución canónica; dicho trabajo se ha utilizado para estudiar la dependencia de la temperatura de las estructuras de las dislocaciones de aluminio. Otro método fue propuesto por Wu y col. (2003), en el que se define una función de partición que sólo depende de los átomos representativos basada en la colectividad canónica. Dupuy y col. (2005) desarrollaron un método en el que integran Dinámica Molecular en la estructura del método QC 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 han sido desarrollados para problemas en equilibrio a temperatura constante. Debido a esto, Y. Kulkarni en Caltech, desarrolló (Kulkarni, 2006) una forma de añadir los efectos de la temperatura a la versión tridimensional y no local del método desarrollado por M. Ortiz y K. Knap.

La nanoindentación, es por tanto, una más de las posibles aplicaciones del método. Podemos utilizar en otras áreas el mismo, como para el estudio de crecimiento de grietas

y nanohuecos, bordes de grano, etc. En este proyecto, trataremos el estudio de materiales indentados con estructura FCC como el argón, el cobre y el aluminio. Usaremos distintos potenciales de diferente complejidad para comparar los resultados entre los mismos así como con resultados obtenidos con DM. Con este método tendremos la ventaja de tener margen a la hora de seleccionar una velocidad de indentación y lo podremos hacer con desequilibrio termodinámico.

El trabajo se estructura de forma que, en el capítulo 2 se explica el Método de Máxima Entropía, se explican las bases del método QC y se detalla la extensión del QC a problemas en desequilibrio termodinámico (HotQC). En el capítulo 3, la descripción del modelo de cálculo, es decir, el tratamiento numérico del problema así como una explicación de diversas rutinas programadas, entre ellas, un indentador tipo Berkovich. En el capítulo 4, se expondrán los resultados obtenidos con los diversos materiales y configuraciones. Finalmente, en el capítulo 5, se detallarán las conclusiones y posibles trabajos futuros y en el apéndice se incluyen los potenciales usados durante el trabajo.