



RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo es explorar el comportamiento de los materiales en un régimen extremo de presiones, temperaturas y velocidad de deformación, utilizando simulaciones atómicas clásicas. La exploración experimental de este régimen es a veces posible gracias a los láseres de alta potencia, pero se requiere teoría y modelado para planificar y comprender estos experimentos complejos. Este régimen es importante no solamente por la posibilidad de lograr nuevos materiales mejorados, sino también por la comprensión del núcleo de la Tierra y de otros procesos astrofísicos como las colisiones de meteoritos. Las simulaciones ampliarán nuestra comprensión sobre la resistencia de los metales (puros y aleaciones), que podría aproximarse a la resistencia teórica máxima a altas velocidades de deformación. El hierro (Fe) en particular es un material de interés para aplicaciones tecnológicas y también por ser el componente principal del núcleo terrestre. Además, se también se estudian un nuevo tipo de aleaciones denominadas aleaciones de alta entropía, de gran interés tecnológico dadas a sus características térmicas y mecánicas. Se realizaron estudios sobre Fe de fase hexagonal compacta para estudiar su estabilidad utilizando interacciones atómicas de un relativo bajo costo computacional. Aquí se encontraron resultados comparables con datos sismológicos y con otras simulaciones, incluyendo simulaciones de primeros principios. Además, se estudió la transformación reversible de fase del hierro desde una fase hexagonal compacta a una cúbica centrada en el cuerpo encontrado una excelente relación entre resultados experimentales de ondas de choque con simulaciones computacionales de tensión y compresión.

Como ejemplo de aleación sencilla de interés tecnológico y para el núcleo de la Tierra, se realizaron simulaciones de nanoindentación para una aleación de FeNi, y se encontró que la dureza máxima corresponde a una muestra equiatómica.

Para las aleaciones de alta entropía se estudió el efecto del tamaño de grano para aleaciones de HfNbTaZr, con estructura similar a la del Fe a bajas presiones, observando una mayor actividad en las dislocaciones y maclas para tamaños de grano mayores y un mayor deslizamiento de los bordes de granos para tamaños de grano más pequeños. También se estudió otro tipo de aleación compuesta de FeNiCrCoCu. Se estudiaron muestras nanoporosas y el efecto de su complejidad química encontrando una asimetría en la compresión y tensión de estas muestras. Finalmente, en esta aleación de FeNiCrCoCu se estudió el daño producido por una cascada de radiación, observando que en esta etapa la complejidad química no produce una mayor resistencia a la radiación.

Doctorando: Orlando Raúl Deluigi.
Año 2024.