

Índice de temas

Introducción	1
Motivación	4
Organización	5
Capítulo 1: Metodología	7
1.1. Potenciales de interacción	7
1.1.1. Potenciales tipo EAM.....	8
1.1.2. Potenciales tipo FS.....	9
1.2. Programas de cálculo	10
1.2.1. Dinámica molecular (MD).....	10
1.2.2. Monte Carlo (MC).....	13
Capítulo 2: Diagrama de fases del sistema Fe-Cu	15
2.1. Introducción	15
2.2. Construcción del diagrama de fases	16
2.3. Cálculo de la energía libre de Gibbs	17
2.3.1. Cálculo de la integral de la entalpía.....	19
2.3.2. Cálculo de la energía libre del estado de referencia.....	19
2.3.2.1. Estado de referencia para fases sólidas con un componente.....	20
2.3.2.2. Estado de referencia para la fase líquida con un componente.....	20
2.3.2.3. Estado de referencia para fases sólidas con dos componentes.....	21
2.3.2.4. Estado de referencia para la fase líquida con dos componentes.....	22
2.3.2.5. Comentarios sobre la energía libre de los estados de referencia.....	22
2.3.3. Transición entre el estado de referencia y el potencial de referencia...	23
2.3.4. Diferencia de energías libres entre los potenciales real y de referencia.	23
2.3.4.1. Diferencia de energías libres de Helmholtz para las fases sólidas.....	24
2.3.4.2. Diferencia de energías libres de Helmholtz para la fase líquida.....	25
2.3.5. Resumen de ecuaciones para el cálculo de la energía libre de Gibbs...	25
2.4. Método de cálculo	27
2.4.1. Generación de muestras.....	27
2.4.2. Determinación de la entalpía en función de la temperatura.....	28
2.4.3. Transición adiabática para las fases sólidas.....	29

2.4.4.	Transición adiabática para la fase líquida..	30
2.4.5.	Transición entre estado y potencial de referencia para la fase líquida. . .	31
2.4.6.	Nota sobre las transiciones para la fase líquida..	32
2.5.	Coefficientes de las funciones de energía libre de Gibbs	33
2.5.1.	Elementos.	33
2.5.2.	Aleaciones	36
2.6.	Cálculo del diagrama de fases	41
2.6.1.	Diagrama de fases del sistema Fe-Cu.....	41
2.6.2.	Verificación en muestras solidificadas.....	44
2.6.3.	Verificación por generación de muestras.,	44
2.6.4.	Curvas de energía libre de Gibbs $g(T,x)$	45
2.7.	Conclusiones,	48
Capítulo 3: Migración de solutos bajo gradientes térmicos..		51
3.1.	Introducción.....	51
3.2.	Ecuación de difusión con gradientes térmicos.	52
3.3.	Simulaciones MD.	54
3.3.1.	Medición del calor de transporte.....	55
3.3.2.	Aplicación de <i>spikes</i> unidimensionales	57
3.4.	Calor de transporte en el sistema Ni-Au	57
3.4.1.	Medición del calor de transporte.....	57
3.4.2.	Cálculos de verificación.....	59
3.5.	Calor de transporte de Cu en Fe	62
3.5.1.	Medición del calor de transporte.,	62
3.5.2.	Cálculos de verificación.....	64
3.6.	Resumen y conclusiones	65
3.6.1.	La aventura del calor de transporte de Cu en Fe.:	66
Capítulo 4: Interfases de solidificación		69
4.1.	Introducción	69
4.2.	Solidificación en condiciones extremas	72
4.3.	Definición de rangos de solidificación.	75
4.4.	Solidificación en condiciones controladas	77
4.4.1.	Solidificación de equilibrio.....	78
4.4.2.	Solidificación bajo gradientes térmicos.....	80
4.4.3.	Verificación con modelos analíticos.....	83
4.5.	Conclusiones.	85

Capítulo 5: Redistribución de solutos en cascadas.....	89
5.1. Introducción.....	89
5.2. Cascadas cilíndricas (<i>tracks</i>).....	90
5.3. Simulaciones MD de <i>tracks</i>	90
5.4. <i>Track</i> en Ni-5 % Au.....	91
5.5. <i>Track</i> en Au5%Ni.....	94
5.6. Conclusiones de los resultados en cascadas cilíndricas.....	97
5.7. Cascadas esféricas (<i>spots</i>).....	98
5.8. Simulaciones MD de <i>spots</i>	99
5.8.1. Medición de concentraciones.....	99
5.8.2. Elección de los rangos modelados.....	101
5.9. Resultados de los <i>spots</i>	102
5.9.1. Evolución de las muestras.....	102
5.9.2. Distribución del soluto.....	105
5.9.3. Cálculos con masa de Cu modificada.....	106
5.10. Conclusiones de los resultados en cascadas esféricas.....	107
Capítulo 6: Conclusiones y perspectivas.....	109
Referencias.....	115