
Índice general

Resumen	I
Abstract	III
Prólogo	XI
I Dinámica y termodinámica de sólidos amorfos	1
1. Introducción	5
1.1. Amorfización inducida por presión	5
1.2. Mecanismos de amorfización	11
1.3. Simulaciones computacionales	13
1.4. Propósito de la primera parte	16
2. Mecanismos de amorfización inducida por presión	19
2.1. Motivación	19
2.2. Descripción del modelo	25
2.2.1. Configuraciones de energía mínima en el estado fundamental	26
2.2.2. Detalles de las simulaciones	28
2.3. Resultados a temperatura cero	30
2.3.1. Interacción a segundos vecinos y el límite de estabilidad mecánica	36
2.3.2. Comparación entre estructuras amorfas	38
2.4. Efectos de temperatura finita	38
2.5. Discusión	43
3. Transformaciones martensíticas y el efecto de memoria en vidrios	47
3.1. Motivación	47

3.2.	Descripción del modelo	50
3.2.1.	Detalles de las simulaciones	51
3.3.	Mecanismo ideal de transformación martensítica	53
3.4.	Nucleación y crecimiento en el caso de barrera de energía pequeña	55
3.5.	Crecimiento inhibido para barrera de energía alta	62
3.5.1.	Efecto de memoria en vidrios	67
3.6.	Discusión	69
4.	Tensiones de corte en sólidos amorfos inducidos por presión	75
4.1.	Motivación	75
4.2.	Detalles numéricos de las simulaciones	79
4.2.1.	Condiciones iniciales y protocolo	83
4.3.	Amorfización asistida por deformación de corte	84
4.4.	Comportamiento del límite de fluencia	87
4.5.	Rotación de granos cristalinos en coexistencia cristal-amorfo	90
4.6.	Discusión	91
5.	Termodinámica de transformaciones de colapso de volumen	95
5.1.	Motivación	95
5.2.	Modelo	99
5.3.	Solución a $T = 0$: estado mixto	104
5.4.	Solución a temperatura finita	109
5.4.1.	Solución para $\gamma = 0$	109
5.4.2.	Solución para $\gamma \neq 0$	112
5.5.	Discusión	116
II	Dinámica fuera de equilibrio de líneas elásticas en medios desordenados	119
6.	Introducción	123
6.1.	Líneas elásticas en sistemas desordenados	123
6.1.1.	Líneas elásticas	123
6.1.2.	Líneas elásticas en sistemas desordenados	127
6.1.3.	Vórtices en sistemas desordenados	129

6.2.	Dinámica fuera de equilibrio de sistemas vítreos	130
6.2.1.	Envejecimiento	130
6.2.2.	Teorema de fluctuación-disipación	133
6.2.3.	Funciones de distribución y heterogeneidades	135
6.3.	Propósito de la segunda Parte	135
7.	Envejecimiento en la fase vítrea de líneas elásticas en medios desordenados	137
7.1.	Motivación	137
7.2.	Modelo y cantidades de interés	140
7.2.1.	Hamiltoniano del modelo	140
7.2.2.	Protocolo y cantidades de interés	143
7.3.	Comparación con el vidrio de vórtices	145
7.4.	Efectos de tamaño finito	147
7.4.1.	Ecuación de EW	147
7.4.2.	Fase líquida	151
7.4.3.	Fase vítrea	152
7.5.	Envejecimiento en función de la temperatura	154
7.5.1.	Correlación densidad-densidad $C(k, t, t_w)$	154
7.5.2.	Desplazamiento cuadrático medio $B(t, t_w)$	157
7.5.3.	Respuesta integrada $\chi(t, t_w)$	160
7.6.	Envejecimiento de líneas elásticas no interactuantes	160
7.7.	Envejecimiento multiplicativo y violación del TFD	162
7.8.	Discusión	170
8.	Distribuciones de rugosidad de líneas elásticas en medios desordenados	173
8.1.	Motivación	173
8.2.	Modelo	176
8.3.	Evolución temporal de la distribución de rugosidad: resultados numéricos	177
8.3.1.	Temperaturas altas, $T = 0.2$	180
8.3.2.	Temperaturas bajas, $T = 0.05$	184
8.4.	Hipótesis de escala	186
8.5.	Discusión	190

III Conclusiones	193
9. Conclusiones	197
9.1. Dinámica y termodinámica de sólidos amorfos	197
9.2. Dinámica fuera de equilibrio de líneas elásticas en medios desordenados	199
9.3. Conclusiones generales	200
A. Publicaciones relacionadas con esta Tesis	203
Gracias, muchas gracias...	213