

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POST-GRADO



SIMULACIÓN ATOMÍSTICA DE LA FRACTURA DINÁMICA EN UN
MATERIAL FRÁGIL

POR

JORGE ADRIÁN ALDACO CASTAÑEDA

TESIS

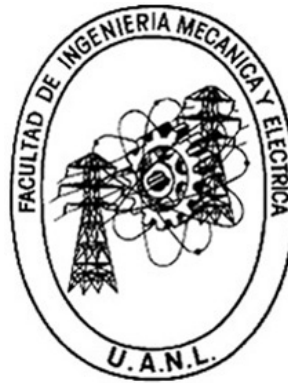
EN OPCIÓN AL GRADO DE DOCTOR EN INGENIERÍA DE MATERIALES

SAN NICOLÁS DE LOS GARZA, N.L., A 5 de diciembre de 2011

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POST-GRADO



SIMULACIÓN ATOMÍSTICA DE LA FRACTURA DINÁMICA EN UN
MATERIAL FRÁGIL

POR

JORGE ADRIÁN ALDACO CASTAÑEDA

TESIS

EN OPCIÓN AL GRADO DE DOCTOR EN INGENIERÍA DE MATERIALES

SAN NICOLÁS DE LOS GARZA, N.L., A 5 de diciembre de 2011

© Copyright by
Jorge Adrián Aldaco Castañeda
2011

Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica

División de Estudios de Posgrado

Los miembros del Comité de tesis recomendamos que la Tesis “Simulación Atomística de la Fractura Dinámica en un Material Frágil” realizada por el alumno Jorge Adrián Aldaco Castañeda con número de matrícula 710107 sea aceptada para su defensa como opción al grado de Doctor en Ingeniería de Materiales.

El Comité de Tesis

Dr. Moisés Hinojosa Rivera

Asesor

Dr. Martín Edgar Reyes Melo

Revisor

Dr. Virgilo Angel González González

Revisor

Dr. Orlando Susarrey Huerta

Revisor

Dra. Oxana Vasilievna Kharissova

Revisor

Vo. Bo.

Dr. Moisés Hinojosa Rivera

División de Estudios de Posgrado

Ciudad Universitaria, a 5 de diciembre de 2011

A mi familia:

*A mis padres y hermano
porque gracias a ustedes
he culminado esta etapa
de mi vida.*

A la memoria de:

*Mi tío Beto †, Virginia †,
pirata † y Emily †*

AGRADECIMIENTOS

A Dios.

Al CONACYT y al PAICYT de la UANL por los apoyos financieros brindados a mi persona y a este proyecto de investigación, respectivamente.

Al DIMAT de la FIME, UANL y al CIIDIT de la UANL por la instrucción académica prestada y por el apoyo recibido para la realización de esta investigación.

Al Dr. Moisés Hinojosa Rivera por su confianza, apoyo, asesoramiento y revisión de este trabajo.

A la Dra. Oxana Vasilievna Kharissova, al Dr. Martín Edgar Reyes Melo, al Dr. Virgilio Angel González González y al Dr. Orlando Susarrey Huerta por las revisiones de este documento.

A la Dra. Satu Elisa Schaeffer por las observaciones hechas a los códigos implementados en este trabajo y por permitirme el uso de un computador.

Al Dr. Max Salvador por su orientación al inicio de este proyecto y al Dr. Luciano Colombo por la facilitación de un código para realizar simulaciones de dinámica molecular.

A Rosa Ma. Torres Luevano y a Jesús Garza Paz por su amistad y sus comentarios de aliento, en particular a Garza Paz mi gratitud también por la revisión de este escrito.

A José Alejandro Cázares Yeverino por la camaradería y su asistencia administrativa.

Al Ing. Gabino Morales, Francisco Garza, Ricardo Ordaz, Reyna Nájera, Karina Riojas, Karla González, Anaí Partida, Yumei Mata, Maribel Hernández, Lupita Mata, Graciela Soriano y Gloria Saucedo por su ayuda, aliento y amistad. A Zahir Valdez Nava por su apoyo técnico.

A Isela Mata por su respaldo absoluto, su cariño y por estar a mi lado.

A tantos compañeros de la FIME que me exhortaron a culminar esta empresa.

Y a todas aquellas personas que de alguna u otra forma me han apoyado y brindado su amistad, en especial, a la familia Castro Castillo.

ÍNDICE

DEDICATORIA	IV
AGRADECIMIENTOS	V
RESUMEN	IX
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO 2. EL FENÓMENO DE LA FRACTURA DINÁMICA	6
2.1. Introducción	6
2.2. Teoría del continuo de fractura dinámica	8
2.3. Experimentos de fractura dinámica	11
2.4. Modelos recientes de fractura dinámica	13
2.4.1. Modelo discreto — Modelo de red	14
2.4.2. Modelo discreto — Simulaciones por dinámica molecular de la fractura dinámica	16
2.5. Notas relativas a la teoría del continuo, a los experimentos y a las simulaciones de la fractura dinámica.	20
CAPÍTULO 3. SIMULACIÓN DE LA FRACTURA POR DINÁMI- CA MOLECULAR	22
3.1. Introducción	22
3.2. Ecuaciones de movimiento	23
3.3. Leyes de fuerza	24
3.4. Integración de las ecuaciones de movimiento	26

3.5. Condiciones de frontera	28
3.6. Determinación de la energía y de los esfuerzos a nivel atómico	30
CAPÍTULO 4. MOTIVACIÓN E HIPÓTESIS	31
CAPÍTULO 5. EL MODELO	33
CAPÍTULO 6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	39
6.1. Introducción	39
6.2. Morfología de la fractura y estructura	39
6.2.1. Amortiguamiento	45
6.3. Velocidades de la grieta	49
6.4. Energía y esfuerzos	53
6.5. Comentarios finales	55
CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS DE TRABAJOS FUTUROS	59
7.1. Conclusiones	59
7.2. Perspectivas de trabajos futuros	61
APÉNDICE A. Potenciales empíricos SW, MSW1 y MSW2	64
BIBLIOGRAFÍA	66
LISTA DE FIGURAS	76
LISTA DE TABLAS	77
RESUMEN AUTOBIOGRÁFICO	78

RESUMEN

En el presente trabajo se realizaron simulaciones de dinámica molecular de un modelo de tensión uniaxial bajo altas tasas de deformación ($\approx 3.9 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$), las cuales permitieron la generación y la caracterización de la fractura dinámica en un nanomaterial frágil ideal (silicio) preagrietado.

El objetivo logrado fue obtener la *rapidísima* propagación de la grieta (la velocidad máxima promedio calculada fue $\approx 2 \text{ km/s}$) en *pequeñas* muestras, con características similares a las observadas en experimentos a nivel macro, en otras simulaciones y en la teoría. Entre éstas semejanzas estuvieron la morfología de las superficies, los valores promedios e instantáneos de la velocidad de la grieta, la propagación frágil de la grieta en los planos de clivaje y la influencia de los componentes tensoriales del esfuerzo en la trayectoria de la grieta.

Además de la aportación antes descrita, se alcanzaron los objetivos específicos siguientes:

- Observar en las superficies de fractura simuladas una *similitud* con respecto a las obtenidas en experimentos a nivel macro, lo que muestra el concepto de autoafinidad de las superficies.
- Analizar la influencia de algunos componentes (potenciales interatómicos empíricos, planos de propagación, temperatura inicial del material, condición de frontera) del modelo en la propagación de la grieta.
- Sugerir un camino de propagación de la grieta con base en los máximos valores del tensor de esfuerzos atómicos.

Para cumplir dichos objetivos, se desarrolló inicialmente un modelo discreto general que permitiera generar la fractura dinámica en silicio. Éste se elaboró utili-

zando las ideas aportadas por diversos investigadores; posteriormente, se hicieron las adecuaciones pertinentes en el sistema de propagación de la grieta (planos y direcciones), en el tamaño de las muestras y las muescas, en los potenciales interatómicos, en la temperatura inicial de las muestras, en la velocidad de deformación y en el valor del coeficiente de amortiguamiento en la frontera de las muestras. Entonces, se simularon esos modelos particulares por dinámica molecular, programada en *fortran*, para asignar las temperaturas iniciales de las muestras, y luego, las deformaciones de las mismas. Esto conllevó, en la mayoría de los casos, a la fractura dinámica de las muestras.

Al variar los elementos anteriores de los modelos se producía la propagación o detención de la grieta, ductilidad o fragilidad del material, morfología rugosa o lisa de las superficies de fractura, altas o bajas velocidades de la grieta, estructura cristalina o amorfismo, entre otros efectos; lo que dio la pauta para la selección adecuada de los componentes y condiciones que generaran la fractura dinámica frágil.

Durante las simulaciones se recopilaban –cada cierto intervalo de tiempo– datos de posición, energía, deformación y esfuerzos atómicos. Las posiciones atómicas permitieron visualizar las propagaciones de las grietas al introducir esos datos en el programa XMakeMol –las posiciones, aunadas a los tiempos, sirvieron para calcular las velocidades–, fue entonces que las fracturas producidas se compararon con las observadas en otras simulaciones y experimentos a nivel macro, notando similitudes entre ellas. Finalmente, las magnitudes de los esfuerzos asociados a los átomos –visualizados en el mismo programa– permitieron sugerir el camino seguido por la grieta.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Los materiales que forman las estructuras comúnmente contienen grietas¹, aunque en muchos de los casos éstas resultan inofensivas, es decir, no evolucionan a la fractura². [2] Sin embargo, cuando esas grietas –de cierto tamaño crítico– se sitúan en regiones donde puedan presentarse altas deformaciones, entonces sí deben verse como potenciales iniciadores de la fractura³. Encontrar y estudiar esas grietas, que constituyen un riesgo, es un objetivo principal de la *mecánica de la fractura*⁴. [1, 2, 4] Esta joven ciencia se ha desarrollado a través del siglo 20 –principalmente, debido al aporte de ingenieros y físicos [7], después de la segunda guerra mundial [2, 5]– con lo cual hoy en día se tiene un mayor entendimiento de cómo fallan los materiales y un conocimiento superior para prevenir tales fallas; no obstante, aún falta mucho por aprender. [1, 8, 9] Y si bien se siguen presentando fallas catastróficas de

¹ Definidas como separaciones en los materiales causadas por aberturas o deslizamientos, con las distancias de separación sustancialmente más pequeñas que las extensiones de la separación (longitudes de la grieta). En casos extremos, la distancia de separación puede ser del orden de la distancia atómica, y la longitud de la grieta, que sigue siendo mayor a esta distancia, puede ser más pequeña que algunas de las más grandes dimensiones microestructurales, por ejemplo el tamaño de grano [1].

² Definida como el proceso de quiebre o ruptura de los materiales [1].

³ De hecho, la resistencia a la tensión de cualquier material está gobernada por la existencia de las grietas dentro de él. [3]

⁴ Esta ciencia cuantitativa se considera [4, 5] que inicia en 1920 a partir del artículo de Griffith [6]. En éste se postuló un criterio de ruptura: Para crear una superficie de fractura se necesita suministrar, en un nivel *microscópico*, una cierta cantidad de trabajo por unidad de área. El cálculo de ese trabajo se puede realizar al asumir que existe una relación entre fuerza y desplazamiento que gobierna la interacción de los *átomos o moléculas* a través del plano de fractura.

estructuras, éstas se dan –en ocasiones– porque el conocimiento existente se aplica negligentemente durante el diseño, construcción, u operación de las estructuras [2] ⁵.

Una vez que se manifiesta la propagación de la grieta, se pueden presentar altas (> 1000 m/s) o bajas (< 1 mm/año) velocidades de propagación de la fractura, según las condiciones de fuerza o carga (estática, dinámica, carga controlada, agarre controlado, etcétera) y ambientales (temperatura, ambiente corrosivo, etcétera). Al presentarse altas tasas de carga se vuelven relevantes algunos efectos que no se consideran en la *Mecánica de la Fractura* en su parte Lineal Elástica (MFLE), por ejemplo: la respuesta del material a las tasas aplicadas, las fuerzas de inercia y las ondas de esfuerzos reflejadas. Estos sucesos influyen en los campos de esfuerzos y de deformaciones locales en la punta de la grieta, los cuales, a su vez, afectan la conducta de la fractura. Por eso, dentro de la *mecánica de fractura* se maneja la subespecialidad llamada *mecánica de la fractura dinámica*⁶. Gracias al aporte de investigadores y profesionales en el campo se ha desarrollado esta subespecialidad a través de diversos caminos⁷ [11], entre éstos están [4]: el diseño ingenieril [12] y la selección de materiales [3], el análisis de algunos fenómenos naturales (por ejemplo: terremotos [12]), el desarrollo de técnicas experimentales y de observación [12], y el planteamiento y la solución de los problemas matemáticos propios de la fractura [12].

Y aunque actualmente se tienen muchos avances teóricos y experimentales [4] aún persisten fenómenos de la fractura dinámica que no están completamente entendidos [13, 14, 15, 12], entre éstos están: la existencia de una aparente velocidad terminal de la grieta muy inferior a la velocidad de onda de Rayleigh en vidrio y en

⁵ Algunos autores [2] mencionan que los procedimientos existentes son suficientes para evitar la falla, pero otros [10] señalan que las teorías existentes de fractura dinámica, en las que se asume la conducta lineal elástica de los materiales, son insuficientes para predecir la falla de los materiales.

⁶ La fractura dinámica surge cuando se aplica una carga rápidamente en un sólido agrietado (ver pág. 3 en [4]) o cuando sucede una propagación rápida de la grieta. [4] Sharon *et al.* [3] comentan que el crecimiento dinámico de una grieta se da cuando la grieta se propaga a velocidades del orden de la velocidad del sonido en el material.

⁷ Es a partir de 1940 cuando inicia esta subespecialidad, aunque el reconocimiento de la importancia de la propagación y de la detención de la grieta se empezó a dar dentro de la ingeniería y de las ciencias de la tierra a partir de 1970. [4]

algunos otros materiales muy frágiles [13, 14, 16, 3, 8], la inestabilidad dinámica de la punta de la grieta [13, 14, 15, 17, 18, 16, 12, 3, 8, 19, 20], la bifurcación simétrica en dos ramificaciones de una grieta que originalmente se propaga rápidamente de forma recta en un campo tensil, la influencia del calor generado durante la fractura rápida en el proceso de separación o en la distribución de esfuerzos [14], así como la modelación atómica de clivaje dinámico. [4]

Posiblemente, una de las causas por la que la *mecánica de la fractura dinámica* no logra explicar todos los fenómenos observados sea que ésta aborda el problema afuera de una región (*zona de proceso*) situada en la punta de la grieta [13], y es en esa región donde ocurre la disipación de la energía [13].⁸

La imposibilidad teórica para esclarecer lo que sucede en la *zona de proceso*, limita la comprensión de los efectos que rodean la propagación de la fractura [13], de ahí que algunos investigadores se hayan dado a la tarea de desarrollar nuevos modelos (discretos), por ejemplo aquellos que involucran la Dinámica Molecular (DM)⁹. La naturaleza propia de este tipo de simulación computacional [25, 26, 27, 28, 29, 30] la vuelve ideal para buscar la caracterización del proceso *interno* de la fractura [16, 31, 32, 24], ya que la fractura implica fundamentalmente la ruptura de enlaces interatómicos [33, 34, 21, 35]; pero aún y con los avances desarrollados en esta metodología¹⁰, sigue existiendo el hecho de que las escalas de longitud y de tiempo

⁸ Otra razones que pueden contribuir a las discrepancias entre la *mecánica de la fractura dinámica* y los resultados experimentales son que en la teoría se considera al material continuo, isotrópico y homogéneo –salvo algunos grandes defectos, comúnmente las grietas, comparados con las dimensiones características de la microestructura–, y además en algunos tratamientos se maneja una conducta elástica lineal del material. [16, 12, 10, 21]

⁹ La primera investigación de este tipo, desarrollada por Ashurt & Hoover en 1976 [22], incluía elementos básicos que hoy en día se siguen utilizando. Entre sus resultados estuvo que la fractura se propagaba a una velocidad límite más baja que la *velocidad de Rayleigh* predicha por la teoría continua elástica, lo que concordaba con los productos obtenidos en experimentos. Pero quizás el aporte más relevante fue que por primera vez se discutía la propagación de la fractura desde un origen atomístico, pues, anteriormente, las discusiones de fractura estaban dominadas por el enfoque continuista de la materia [23]. Actualmente, las simulaciones de DM involucran millones de átomos que interactúan a través de complejas funciones [7, 9, 24].

¹⁰ Desde la investigación de Ashurt y Hoover [22] hasta nuestros días se ha dado un enorme progreso en la capacidad de cómputo, en el desarrollo de ecuaciones de movimiento y de métodos de integración de éstas, en los modelos para determinar las fuerzas interatómicas ya sea a través de mecánica clásica o cuántica, en formulaciones de condiciones frontera e iniciales, entre otras.

que se manejan están por debajo de lo que se observan en el trabajo experimental [15, 31, 33], aunque esto no es un impedimento para *visualizar* el proceso de fractura con resolución atómica [34, 35].

De ahí que se haya escogido a la Dinámica Molecular para continuar el estudio de la fractura¹¹, pero ahora con un énfasis en la fractura dinámica a nivel atómico en silicio¹². La idea inicial de esta investigación era observar qué tanto de las características de las superficies de las fracturas generadas experimentalmente en muestras macroscópicas se mantenían en las superficies simuladas de fracturas en muestras nanométricas¹³. Si bien, como recién se mencionó, las escalas de longitud y de tiempo entre las simulaciones y los experimentos son muy diferentes –y aún más distintas lo son con respecto a las manejadas en la *mecánica de la fractura dinámica*–, se tiene la expectativa de encontrar similitudes con base en el concepto de autoafinidad^{14, 15} [48, 45, 36]. Para ver esto se construyó un modelo discreto general de una nano muestra de silicio pre agrietada sometida a una gran carga de tensión, éste se hizo con diversas y recientes aportaciones generadas por otros investigadores [12, 49, 50, 51, 26, 52, 53, 54], y luego se hicieron algunas variantes (modelos particulares). Estos se simularon por dinámica molecular para ver sus evoluciones, y los resultados de las diferentes características y parámetros cuantificados (morfologías, trayectorias, velocidades límites, promedios e instantáneas, entre otros) se compararon con lo observado en experimentos y en otras simulaciones –realizadas

¹¹ Hace algunos años se dieron los primeros pasos en la investigación de la fractura a nivel macroscópico dentro de un grupo de trabajo del posgrado de Materiales, FIME, UANL. En aquel momento se tuvo la oportunidad de contribuir con un trabajo de investigación [36], de entonces a la fecha, ese grupo ha ido madurando a través de la publicación de diversos trabajos teóricos y experimentales [37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44].

¹² Este es un material cristalino anisotrópico considerado como frágil [33], que ha sido ampliamente estudiado [33, 21] y aplicado a nivel tecnológico [33].

¹³ La morfología de las superficies fracturadas presenta correlación con la velocidad instantánea de la punta de la grieta. [13, 15]

¹⁴ Este concepto se refiere a la invariancia que presentan las estructuras de las superficies de fractura bajo una transformación afín. [45]

¹⁵ Sin embargo, hay que tener presente que las propiedades mecánicas de los materiales en pequeñas dimensiones pueden ser muy diferentes de las que presentan los materiales macroscópicos, aunque tengan la misma composición. [5, 46, 47]

bajo diferentes metodologías—, y además, con algunos estipulados de la *mecánica de la fractura dinámica*.

Para explicar los detalles involucrados en esta investigación, se decidió dividir este documento en seis capítulos más. En el capítulo 2 se realiza un breve resumen de resultados relevantes teóricos, experimentales y de simulaciones de la fractura dinámica con énfasis en silicio, ésta síntesis sirve como referencia para capítulos posteriores —especialmente para la discusión de resultados— y también para marcar la pauta en la notación fundamental que se utiliza en los subsiguientes capítulos. En el capítulo 3 se citan los componentes fundamentales para realizar una simulación por dinámica molecular de la fractura. En tanto que la motivación y la hipótesis de este trabajo se comentan en el capítulo 4. En el capítulo 5 se establecen los componentes y parámetros del modelo de fractura dinámica en silicio, así como los elementos necesarios para simular dicho modelo por dinámica molecular en *fortran*. Los resultados encontrados y la discusión de los mismos se hace en el capítulo 6. Finalizando con el capítulo 7, en el que se establecen las conclusiones de esta investigación y las posibles líneas de futuros trabajos.

CAPÍTULO 2

EL FENÓMENO DE LA FRACTURA DINÁMICA

2.1. Introducción

La fractura de los materiales es en esencia un proceso dinámico, al menos en su etapa final [31]¹. No obstante, desde un punto de vista práctico, el interés principal suele enfocarse en determinar si la fractura ocurre o no² [56, 1]; sin embargo, los análisis dinámicos en el crecimiento de la grieta también presentan aplicaciones prácticas: son el fundamento teórico en los métodos de diseño para detener una grieta [3], igualmente, son importantes para el estudio de terremotos, en evaluaciones de daño en accidentes, en operaciones mineras, entre otras [1, 3, 9].

El escenario dinámico de la fractura de un material, comúnmente, genera esfuerzos y desplazamientos mayores a los producidos en un escenario estático [5] – fenómeno que se explica por la intersección de las ondas elásticas, producidas por la rápida aplicación de la carga, con las caras de las grietas y con otras fronteras de los

¹ Cox *et al.* [9] mencionan que en alguna escala [55] cualquier fractura es dinámica, pues a pesar de que macroscópicamente una grieta puede avanzar cuasiestáticamente se tienen rupturas de enlaces y éstas son procesos dinámicos.

² Para esto se necesitan precisar las condiciones críticas, creadas por los esfuerzos externos, en las cuales una grieta se empieza a mover [56].

cuerpos—, que conllevan a la liberación de la energía en un corto tiempo³—sin que el material tenga tiempo para que se manifieste el fenómeno de fluencia—. Esto genera la rápida propagación de la grieta, con características observadas de fragilidad [5].

El análisis de la propagación de la grieta se suele hacer a través de *la mecánica de la fractura dinámica* [56]; ésta estudia dos clases de problemas [4, 5]: La primera trata con grietas—sometidas a cargas que cambian lentamente— que alcanzan un punto de inestabilidad, y luego, se propagan rápidamente; y la segunda se relaciona con grietas, inicialmente estacionarias, dentro de cuerpos sujetos a cargas que varían rápidamente⁴, por ejemplo: una carga de impacto. Frecuentemente, estos problemas involucran el rápido crecimiento inicial de la grieta, la velocidad de ésta—que puede llegar a ser de cientos o miles de metros por segundo—, a sus ramificaciones y al paro o detención [5].

El punto de partida de *la mecánica de la fractura dinámica* es la teoría del continuo [11], a través de ésta se logran determinar: el factor de intensidad de esfuerzo dinámico, las deformaciones, los esfuerzos y el flujo de energía en una región cercana a la punta de la grieta [7], pero fuera de la *zona de proceso* [8]. No obstante, esta teoría presenta algunos inconvenientes, por ejemplo: resulta inadecuada para postular un criterio de falla (iniciación, crecimiento y detención) en materiales frágiles, ya que no describe adecuadamente su respuesta dinámica [7]⁵. Enseguida, se resumen algunos aspectos significativos de esta teoría.

³ Se ha encontrado—pág. 36 en [1]— que el flujo de energía—conducido a la región de proceso—requerido para la propagación de la grieta (G) se incrementa con la velocidad de la grieta (v), al menos en altas velocidades (relativas a la velocidad de onda superficial Rayleigh c_R).

⁴ Este problema es analizado en este trabajo.

⁵ Esto sucede porque la teoría de la mecánica de fractura se enfoca en analizar el problema “exterior”, fuera de la región—conocida como *zona de proceso*— en la que se asume suceden los procesos disipadores no lineales de energía que permiten la ruptura de enlaces y el movimiento hacia adelante, o el giro, o la ramificación de la grieta. El tamaño típico de esta zona puede estimarse usando el radio en el cual el campo de esfuerzos elásticos—asumido lineal— que rodea la punta de la grieta iguala al esfuerzo de cedencia del material [8, 57].

2.2. Teoría del continuo de fractura dinámica

La teoría actual de la fractura dinámica se encuentra vinculada al análisis de un modelo continuo mediante el uso de herramientas estándar de elastodinámica (ver Freund [58], Broberg [1] y Ravi-Chandar [7] para más detalles). El resultado principal del estudio de la propagación recta de una grieta en un material lineal elástico es que el campo de esfuerzos en la punta de la grieta resulta singular en la raíz cuadrada de r , similar al caso cuasiestático. Esta parte singular del campo de esfuerzos cercanos a la punta de la grieta puede ser descrita como:

$$\sigma_{\alpha\beta}(r, \theta) = \frac{K_I^{\text{din}}(t, v)}{\sqrt{2\pi r}} \sum_{\alpha\beta}^I(\theta; v) \quad (2.1)$$

donde la amplitud de la singularidad se caracteriza por el parámetro $K_I^{\text{din}}(t, v)$ – llamado *factor de intensidad de esfuerzo dinámico* para una carga aplicada en modo I⁶– el cual es función del tiempo t y de la velocidad de la grieta v , así como de la geometría; r, θ son coordenadas polares centradas en la punta de la grieta; y $\sum_{\alpha\beta}^I(\theta; v)$ son funciones no dimensionales que indican la variación angular del campo de esfuerzos y su dependencia con la velocidad de la grieta. La ecuación (2.1) se torna precisa cuando las dimensiones de la muestra se incrementan.

Dentro del marco de esta teoría, se suele implementar un balance de energía –a través de éste se extiende la teoría de fractura formulada por Griffith, mediante la inclusión de la inercia del material– para obtener la llamada *ecuación del movimiento de la punta de la grieta*:

$$\frac{1 - \nu^2}{E} A(v) \left[K_I^{\text{din}}(t, v) \right]^2 = \Gamma \quad (2.2)$$

donde:

ν es la relación de Poisson

⁶ Modo de apertura de la grieta que corresponde a la aplicación de esfuerzo de tensión en la dirección normal a las caras de la grieta [59].

E es el módulo de Young del material

$A(v)$ es una función universal, independiente de la mayoría de los detalles de la carga en el sistema o de la configuración geométrica. Sólo depende de la velocidad instantánea de la grieta

Γ es la energía de fractura; la cual cuantifica la energía mínima necesaria para romper los enlaces, y también, aquella que precisan los procesos de disipación indispensables para que se propague la fractura. Representa una característica del material –en ciertos casos [8, 7] se ve influenciada por la posición y la velocidad de la grieta– a determinar de manera experimental.

En la ecuación (2.2), el término a la izquierda del igual representa la tasa de liberación de energía, G , ésta se define como la cantidad de energía que fluye a la punta de la grieta por unidad de superficie de fractura formada. La *ecuación del movimiento de la punta de la grieta* puede entonces reescribirse como:

$$G = \Gamma \tag{2.3}$$

Sin embargo, la *ecuación del movimiento de la punta de la grieta* (2.3) no contiene información que indique la trayectoria a seguir por la grieta [8], más bien, se asume que la grieta se propaga en línea recta [8]. Por lo tanto, para complementar la teoría del continuo del crecimiento de la grieta en materiales frágiles homogéneos se precisa de un criterio referente al camino o trayectoria [60]; comúnmente, se maneja el Principio de Simetría Local (PSL)⁷ [61, 62]. Éste establece que la grieta se propaga perpendicularmente a la dirección en la cual se presentan los mayores esfuerzos de tensión [8].

Algunas consecuencias de la teoría del continuo de la fractura dinámica son:

1. La ecuación (2.2) conlleva [63] a predecir que la velocidad máxima alcanzable

⁷ Este criterio sólo se maneja para grietas cuya velocidad (v) es mucho menor que la velocidad de onda Rayleigh (c_R) [8].

por una grieta en una placa infinita es la velocidad de onda superficial de Rayleigh c_R (ver pág. 27 en [8] para detalles).

2. La ecuación (2.2) indica que hay una relación única entre la fuerza conductora de la grieta, caracterizada en términos del factor de intensidad de esfuerzos, $K_I^{\text{din}}(t, v)$, y la respuesta de la grieta, caracterizada por la rapidez de la grieta, v (ver pág. 178 en [7] para mayores referencias).
3. El PSL predice superficies lisas en escalas continuas, es decir, en escalas donde las propiedades mecánicas del material frágil son homogéneas.

Observaciones experimentales en muchos materiales frágiles ([11], [64], [19], pág. 178–184 en [7], [60], [57] y sección 2.3) contradicen las predicciones⁸, lo que sugiere que este modelo de fractura no considera ciertos arreglos esenciales en la conducta dinámica del crecimiento de la grieta [64], por ejemplo: la aparición de micro ramificaciones –inestabilidad⁹– cuando la velocidad alcanza un valor crítico [3, 8].

Algunos investigadores [7] han vislumbrado que la caracterización fundamental de la fractura precisa de identificar, entender y modelar los procesos *reales* que disipan la energía. Con esa finalidad se realizan observaciones experimentales (sección 2.3), se formulan modelos teóricos (ver sección 2.4) y se ejecutan simulaciones de dinámica molecular¹⁰ (ver sección 2.4.2); igualmente, a través de dichas herramientas se busca registrar al detalle la evolución de la *zona de proceso* en la punta de la grieta [7].

A continuación se revisan algunos de esos trabajos relevantes en la dinámica de la fractura desarrollados en materiales cristalinos frágiles¹¹, principalmente en silicio,

⁸ En el caso particular de la relación $K - v$, sí se cumple una unicidad entre estos parámetros, pero sólo en materiales metálicos (dúctiles), ver pág. 184–187 y 189 en [7].

⁹ Ésta ha sido postulada como un aspecto universal de la fractura dinámica [3, 8].

¹⁰ Técnica mencionada por algunos investigadores [8] como la ideal para lograr entender el quiebre de las cosas desde el nivel atómico.

¹¹ Un material idealmente frágil es aquel en el que ocurre la fractura cuando la energía necesaria

pues este material extremadamente frágil [33, 21] de gran aplicación tecnológica [33, 21] fue elegido en la presente investigación para simular la fractura.

2.3. Experimentos de fractura dinámica

Los experimentos son, hasta el día de hoy, la referencia fundamental para sugerir nuevos conceptos que ayuden a entender la física y la mecánica de la fractura dinámica [11, 9]. No obstante, las observaciones detalladas de alta resolución en el régimen dinámico implican un reto severo para caracterizar la fractura, debido a la fragilidad de algunos materiales (por ejemplo: silicio) [33] y a las dificultades para controlar precisamente los experimentos [66, 11], lo que ha conducido a los investigadores de la fractura a concebir nuevos e ingeniosos experimentos [13, 8].

La mayoría de estos ensayos se han enfocado en estudiar materiales amorfos, con pocos estudios en materiales frágiles cristalinos [67, 18, 7]. A continuación, se comentan experimentos realizados en silicio cristalino a temperatura ambiente:

Cramer *et al.* en 1997 [18] se interesaron en estudiar la dinámica del proceso de fractura frágil y la ocurrencia de inestabilidades en éste (vistas previamente en ensayos de materiales amorfos como Polimetilmetacrilato (PMMA) y vidrio [13], y en consideraciones teóricas [68] –ver más adelante pág. 15–). Los experimentos los realizaron [13] en muestras orientadas de tal manera que la dirección de propagación de la grieta fue $\langle 110 \rangle$. La superficie de fractura fue inicialmente lisa, con unas pocas y bien definidas marcas cristalográficas, seguida de una región rugosa. La velocidad promedio de la grieta resultó ser $3/4$ de la velocidad de onda de corte, c_s ¹², y la velocidad más alta fue igual a c_s . Debido al incremento gradual de la región fibrosa¹³

para producir una deformación iguala a la energía termodinámica mínima necesaria para crear nuevas superficies. [57] O bien, un cristal es intrínsecamente frágil si una grieta existente es capaz de propagarse a lo largo de un plano cristalográfico en una manera de clivaje cuando el sólido está bajo esfuerzos. [65] En cambio, un cristal es considerado dúctil si la extensión de la punta de la grieta está acompañada por deformación plástica. [65]

¹² $c_s = 4700$ m/s [18].

¹³ En materiales amorfos se comenta [67] que en las superficies de fractura se presentan tres dis-

no pudieron definir un claro inicio de las inestabilidades, pero sí establecieron que la velocidad crítica de éstas era dependiente del material.

Hauch *et al.* en 1999 [66] realizaron experimentos de fractura, en los que ensayaron probetas planas preagrietadas en $\{111\} [\bar{1}\bar{1}2]$ ^{14,15} por cargas de tensión. Ellos registraron, en estados estables, la v ¹⁶ en función del flujo de energía conducida a la punta de la grieta G , $v(G)$, de ahí observaron que la v era ≈ 2 km/s para $G = 2.3$ J/m² (antes de ese valor de G la v era de 0 km/s), al incrementar G la v aumentaba, hasta que se alcanzaba la alta tasa de liberación de energía, $G = 16$ J/m², ya que ahí se tenía la velocidad límite ≈ 3.5 km/s $\approx 0.73 c_R$ ¹⁷. En lo relativo a las morfologías generadas, éstas resultaron en superficies de fractura atómicamente planas en bajas tasas de liberación de energía G , mientras que en altas tasas de liberación de energía G detectaron –por microscopia de fuerza atómica– variaciones en la altura, del orden de los 30 nm, de las superficies; sin embargo, estos últimos efectos no logran explicar, completamente, la disipación del exceso energético de las grietas, relativo al mínimo estimado para la propagación de la grieta: $G = \Gamma = 2\gamma$ [69].

Cramer *et al.* en el 2000 [67] también observaron el efecto de la rápida propagación de la grieta en $\{110\} \langle 1\bar{1}0 \rangle$ ¹⁸ al aplicar en las probetas una fuerza de tensión mayor a la necesaria para crear nuevas superficies de fractura. Detectaron, además, que a partir de una velocidad promedio¹⁹ (v_{prom}) de $2/3 c_R$ se presentaban mecanis-

tintas zonas: especular, difusa y fibrosa. Aunque Ravi-Chandar [11] menciona que el reconocimiento de esas tres distintas regiones se basa simplemente en una observación visual, que no corresponde a una distinción clara basada en mediciones de rugosidad.

¹⁴ $\{hkl\}$ es el plano de la grieta y $[uvw]$ es la dirección de la grieta.

¹⁵ El plano (111) es el de clivaje en el silicio [34] y presenta un valor 2γ igual a 2.2 J/m² [69]. γ se define como la cantidad de energía requerida para romper una área unitaria de enlaces atómicos [8].

¹⁶ Cuantificada con una técnica de caída de potencial [70].

¹⁷ $c_{R,(111)} \approx 4.68$ km/s [71].

¹⁸ El plano (110) es el de clivaje en los semiconductores III-V [34] (entre éstos se encuentra el silicio). Este plano ostenta un valor 2γ igual a 3.4 J/m² [34].

¹⁹ Calculada como la relación del camino de la grieta y la duración del proceso de fractura. Esta velocidad es aproximadamente igual a la velocidad de estado estable [67].

mos adicionales (propios del material) de disipación de energía: de una propagación de clivaje proseguía un frente de grieta “facetado” en planos $\{111\}$, seguido de una inestabilidad en el camino que derivaba en la propagación de múltiples grietas. La superficie de fractura generada en estas cargas altas –acordes a la velocidad– correspondía cualitativamente a la morfología especular, difusa y fibrosa. Además del incremento en el área superficial total, detectaron la emisión de fonones, ruido y radiación que impedían que la velocidad se incrementara más allá de $0.85c_R$ ²⁰.

Los resultados de esos trabajos [66, 67] podrían sugerir que el intervalo de velocidades de la grieta de estado estable entre cero y ≈ 2 km/s no están “permitidas” –sugerencia enunciada por Marder & Gross [68] en su modelo teórico (sección 2.4)–, lo que indicaría la existencia de un nivel mínimo de la velocidad de la grieta [35]. A propósito de esto, Beery *et al.* en el 2003 [73] ensayaron especímenes cargados en tres puntos para propagar la fractura, y no encontraron el disturbio antes mencionado, pues ellos reportaron velocidades de propagación de la grieta tan bajas como 30 m/s, tanto a temperatura ambiente como a 77 K.

Sherman en el 2006 [21] continuó [73] la línea de experimentos en probetas fracturadas en tres puntos encontrando velocidades que iban desde el 65 % c_R hasta el 1 % c_R (estos valores concordaban con los obtenidos por Beery *et al.* [73]). Él asoció el intervalo de valores detectados con los diferentes mecanismos de disipación de energía que presentaban las estructuras cristalográficas que interactuaban con los frentes de las grietas.

2.4. Modelos recientes de fractura dinámica

De acuerdo a Ravi-Chandar [11], la principal razón para el fallo de la teoría de la fractura elastodinámica clásica en la predicción de los observables experimentales

²⁰ $c_{R,(110)} \approx 4.5$ km/sec [72].

–obtenidos en altas velocidades de deformación– es la presunción de que los procesos que ocurren en la *zona de proceso* de la fractura –alrededor de la punta de la grieta– consumen la energía en cualquier tasa en que ésta sea entregada por el continuo que la rodea²¹. Implícito en esa suposición está la exclusión detallada de los procesos de ruptura que se dan en esa región, así como la posible evolución de dicha zona –ésta puede volverse muy grande, más de lo que se confía en la teoría–, amén de su dinámica –ésta puede ser independiente de la propagación de las ondas en el cuerpo elástico que (se considera) la rodea–. Entonces, es la *zona de proceso* la clave [11] para la efectiva determinación de la velocidad de la grieta, la rugosidad [7] y la promoción de ramificaciones.

Otros investigadores [74] también han reconocido la importancia de la *zona de proceso*, y la han considerado al postular nuevos modelos de la fractura dinámica. Ravi-Chandar [7] agrupa estos modelos en tres tipos:

- (i) Modelos Discretos — Modelo de Red y Dinámica Molecular.
- (ii) Modelos de Zonas Cohesivas.
- (iii) Modelos Continuos de Daño.

A continuación, se describen brevemente los modelos discretos, pues en el presente trabajo se implementa un modelo discreto: la simulación por dinámica molecular de la fractura dinámica. Los modelos cohesivos y continuos postulados por diversos investigadores son expuestos por Ravi-Chandar [11][7].

2.4.1. Modelo discreto — Modelo de red

Los modelos discretos de fractura han sido considerados en muchas escalas de longitud. En la escala de longitud más pequeña la fractura resulta por la ruptura de enlaces entre átomos.

²¹ Conforme a esa teoría al modificarse el consumo energético de la fractura se produce, solamente, un cambio en la velocidad de propagación de la grieta.

Slepyan & Fishkov [75] y Slepyan [76] presentaron un modelo dinámico de una red atómica en la que se propagaba rápidamente una grieta; Marder & Gross en 1995 [68] examinaron un poco más ese modelo, para evaluar soluciones de estados estables. En su investigación, analizaron el crecimiento de una grieta en una red de masas unidas por enlaces ideales tipo resorte, con un modelo prescrito para la conducta de los resortes. A través de éste, determinaron que:

- Existen estados lineales estables de “entrampamiento de la red” en los que no existe crecimiento de la grieta, aunque la carga exceda la resistencia de la red. Estos estados fueron discutidos primero por Thompson (1971) [77].
- El crecimiento estable de la grieta en la red no era posible en bajas velocidades; a este efecto, le llamaron “gap de velocidad” o intervalo de “velocidades prohibidas”.
- El crecimiento de la grieta en estado estable era posible en el intervalo de velocidades desde 0.3 hasta 0.7 de la velocidad de onda de la red.
- El crecimiento estable de la grieta –en un camino dado de la red– se tornaba inestable en muy altas velocidades, pues aparecían ramificaciones; este resultado, lo interpretaron como una indicación de una velocidad límite.

Sin embargo, el entrampamiento de la red no ha sido observado o demostrado, pues técnicamente este fenómeno sólo existe a la temperatura de cero Kelvin [57]. El intervalo de “velocidades prohibidas” *parece* no presentarse prácticamente (Dally [78], Hauch & Marder [70], Holland & Marder [33] y sección 2.3), pues a temperatura ambiente se presentan fluctuaciones térmicas lo suficientemente grandes que activan el avance de las grietas a cualquier velocidad [57]. Aunque existen otros experimentos que evocan este efecto [66].

2.4.2. Modelo discreto — Simulaciones por dinámica molecular de la fractura dinámica

Las simulaciones de dinámica molecular del agrietamiento se realizan en un arreglo de red regular de átomos, modelados con un potencial de interacción conocido, con la expectativa de obtener una indicación numérica de cómo evoluciona la fractura rápida.

Las primeras simulaciones de dinámica molecular de la fractura de materiales datan desde hace casi 35 años [22]. A lo largo de estos años, las simulaciones se han desarrollado siguiendo dos distintos enfoques [12]: Identificar al nivel más simple ciertos mecanismos genéricos de la fractura o determinar resultados de la fractura en el nivel más alto posible de precisión para un material en particular.

A continuación se toma la segunda orientación para analizar las simulaciones de dinámica molecular de la fractura de silicio monocristalino preagrietado, sometido a cargas de tensión uniaxial (modo I); sin dejar de considerar, en etapas posteriores de este trabajo, aquellas simulaciones no relacionadas con silicio [22, 65, 15, 79, 17, 55, 20, 53, 31, 12, 10, 80] que incluyen avances importantes en las condiciones de frontera e iniciales, metodologías, algoritmos, resultados y tendencias en la simulación de la fractura de materiales.

2.4.2.1. Simulaciones por dinámica molecular de la fractura en silicio

Holland *et al.* [81] en 1998 simularon la deformación adiabática (que eventualmente llevaba a la propagación de una grieta) de probetas planas cristalinas (110) $[1\bar{1}0]$ y (111) $[01\bar{1}]$ —modeladas con un potencial atómico Stillinger-Weber (SW) modificado [50]— verificando algunos alcances del modelo de red ²².

²² Al propagarse la grieta, en estado estable, dejaba tras de sí superficies atómicamente planas, a la vez, emitía fonones a con una velocidad de fase igual a la velocidad de la grieta. La mínima velocidad posible de la grieta fue del orden del 20% de la velocidad de sonido transversal, en tanto que abajo de un flujo de energía crítico ($G_{c\text{inf}}$) se volvía imposible el movimiento de la grieta y

Pérez *et al.* [34] en el 2000 realizaron simulaciones de dinámica molecular, basadas en un pseudopotencial de energía total [82], para estudiar la anisotropía del clivaje. Los resultados de este trabajo revelaron que la grieta se propagaba fácilmente en los planos $\{111\}$ y $\{110\}$ en la dirección $\langle\bar{1}10\rangle$; en contraste, si la grieta se conducía en el plano $\{110\}$ en la dirección $\langle 001\rangle$ se presentaba un proceso de ruptura discontinuo que tenía asociado una pronunciada relajación de los átomos localizados en los alrededores de la grieta, lo que a su vez generaba un gran entrapamiento de la red. Estos comportamientos explicarían la anisotropía observada experimentalmente en el clivaje [83].

Bernstein & Hess [84] en el 2001 ejecutaron simulaciones para analizar la influencia del potencial interatómico en la propagación de la grieta. Para eso manejaron 2 diferentes tipos de muestras $(11\bar{1})\langle 1\bar{1}0\rangle$: en una modelaron el material con un Potencial Interatómico Dependiente del Ambiente (PIDA o EDIP por su nombre en inglés: Environment Dependent Interatomic Potential) [85], y en la otra manejaron en la *zona de proceso* un método de energía total semi-empírico de Enlace Fuerte (EF o TB por su nombre en inglés: Tight-Binding) [86] y en el resto de la muestra utilizaron EDIP. La grieta TB exhibió una propagación frágil similar a los experimentos [66] y los resultados de $v(G)$ mostraron que al incrementarse G aumentaba la v , con un mínimo entrapamiento de la red, pero al alcanzarse una velocidad límite de 2.7 km/s (60% c_R del EDIP [87]) se daba un descenso en la v al aumentar G , en lugar de incrementarse como sucede en la práctica [66]. La grieta EDIP se propagó de manera dúctil y sólo a partir de cargas muy altas ($G > 20$ J/m²).

Swadener *et al.* [88] en el 2002 simularon la fractura bajo condiciones estables en 3 probetas isotérmicas²³ $(111)[2\bar{1}\bar{1}]$ de diferentes tamaños (en el orden de los Angstroms), modeladas con un potencial interatómico derivado del Método Modi-

por arriba de una tasa de energía crítica ($G_{c\text{sup}}$) el movimiento de la punta de la grieta se tornaba inestable.

²³ Mantenido en 300 K, mediante la utilización de un termostato Nosé–Hover [89], aunque en el tercio horizontal central de la muestra donde se encuentra la grieta no controlaron la temperatura.

ficado del Átomo Incrustado (MMAI o MEAM por su nombre en inglés: Modified Embedded Atom Method) [90]. En las 2 muestras de mayor altura²⁴ notaron un entrapamiento de la red –mayor al que se presenta en una grieta TB [84]—, pero una vez que se producía la propagación se tenía un comportamiento $v(G)$ similar al que se tiene en la práctica [66], el registro de la velocidad mostró un máximo de $67 \pm 7\% c_R$ (el valor experimental es de $74 \pm 7\% c_R$ [66]). Igualmente, detectaron que la morfología de la grieta y los reajustes atómicos en las muestras eran función de G , pues en valores menores a 5.5 J/m^2 sólo observaron clivaje, en tanto que al incrementarse G notaron la generación de dislocaciones, y en valores mayores a 10 J/m^2 percibieron saltos, ocasionales, en el plano de propagación de la grieta hacia otro semejante.

Bernstein & Hess [71] en el 2003 retomaron la simulación de la fractura $(11\bar{1})$ $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ realizada con su método atomístico de múltiples escalas: Unión Dinámica de un potencial Empírico (EDIP [85]) con un Enlace fuerte (TB [86]) [UDEE o DCET por su nombre en inglés: Dynamically Coupled Empirical potentials and Tight-binding] [84], para comparar sus resultados de $v(G)$ ²⁵, de morfología y del entrapamiento de la red²⁶ con resultados obtenidos en experimentos [66] y en otras simulaciones basadas en los potenciales SW [51], EDIP [87], TB [86] y MSW (Modificado SW [81, 50] o IMSW por el nombre empleado por Bernstein & Hess [71]). Encontrando, durante el seguimiento de $v(G)$, un pequeño entrapamiento de la red en la simulación UDET [84], éste se incrementaba ligeramente en la simulación IMSW, en tanto que en las simulaciones SW y EDIP se tenía un aumento considerable de este efecto, pues se requería entre 6 y 7 veces más carga que la G_c correspondiente para lograr la propagación de la grieta. En cuanto a la morfología, observaron características frágiles en las grietas simuladas con UDET e IMSW, similares a lo visto en los experimentos

²⁴ En la muestra de altura menor las fronteras influían en la propagación de la grieta.

²⁵ G se encontraba normalizado, es decir, se tenía G/G_c .

²⁶ Efecto citado en la sección 2.4.1, que es función del enlace y de la dirección de propagación.

[66], pero en las simulaciones SW y EDIP advirtieron características dúctiles que incluían formación de dislocaciones. De esto dedujeron que el entrampamiento de la red tendría una importancia significativa en la transición frágil a dúctil.

Buehler *et al.* [35] en el 2007 simularon la propagación de la fractura en 2 muestras isotérmicas²⁷: (111) [112] y (110) [110], de diferentes tamaños nanométricos, modeladas con un potencial híbrido formado por un Campo de Fuerza para Sistemas Reactivos (CFSR o ReaxFF por su nombre en inglés Force Field for Reactive systems) [91] en la *zona de proceso* y un potencial Tersoff [92] en el resto de la muestra. Determinaron la $v(G/G_{0,MD})$ ²⁸, en estados estables del sistema (110), percibiendo un salto discontinuo en la v : de 0 km/s se pasaba a un valor \approx de 3 km/s para $G/G_{0,MD} > 1$, luego, la v se incrementaba, continuamente, conforme G aumentaba, hasta que se alcanzaba un máximo en la v (\approx 4.5 km/s); en el sistema (111) también se presentó esta tendencia, la cual coincidía con resultados experimentales [66]²⁹.

La dinámica de las grietas evocaban el efecto del entrampamiento de la red –posiblemente también el del “gap de velocidad” [68]– observado en experimentos y en otras simulaciones [66, 71, 34, 88], pero contrastaba con los resultados de otras simulaciones efectuadas con potenciales empíricos (SW, Tersoff, EDIP) que predicen un incremento lento de $v(G)$ o ductilidad [66, 91, 85, 51]. Además realizaron una simulación de un sistema (111) para observar los cambios locales que se generaban en la estructura de la punta de la grieta (*zona de proceso*) con relación a incrementos lentos en la carga de tensión, durante ésta también registraron la v instantánea. Los resultados mostraron inestabilidades en la v –inicialmente, se tuvo un salto en la v

²⁷ Mantenido en 300 K, mediante la utilización de un termostato Berendsen [26].

²⁸ $G_{0,MD}$ es definida como la tasa de liberación de energía crítica en el inicio de la fractura. Para calcular ésta, simularon un sistema *infinito* pre agrietado sujeto a una carga que se incrementaba lentamente, con T constante. Durante la simulación registraron la deformación crítica en la que comenzaba la propagación de la grieta, con ésta dedujeron el esfuerzo de fractura crítico aplicado $\sigma_{0,MD}$. Posteriormente, determinaron K a través de la aproximación: $K_I \approx 1.12\sqrt{\pi a}\sigma_0$, y luego obtuvieron G , utilizando $G = K_I^2/E' = 1.12^2\sigma_0^2\pi a/E'$. Así el sistema (111) reflejó una $G_{0,MD} = 5$ N/m, este valor es 2.2 veces mayor que el teórico basado en $G = 2\gamma_0$.

²⁹ A pesar de que en la simulación utilizaron como condición de frontera la aplicación repentina de carga, que es significativamente diferente a la condición empleada en los experimentos.

de 0 km/s a ≈ 2 km/s, y luego, al alcanzarse una $v \approx 69\% c_R$ se dio una caída repentina en la velocidad, seguida de grandes fluctuaciones— que sugirieron estarían ligadas con cambios en la estructura.^{30, 31}

2.5. Notas relativas a la teoría del continuo, a los experimentos y a las simulaciones de la fractura dinámica.

Al cotejar, bajo condiciones *equivalentes*, lo establecido por la teoría del continuo de fractura dinámica (sección 2.2) con los resultados de experimentos (sección 2.3) y de simulaciones de dinámica molecular de la fractura (sección 2.4) generados por Modo I en silicio cristalino, se aprecian algunas concordancias entre éstas: la iniciación de la fractura *obedece* la condición [34] de Griffith: $G = 2\gamma$ [66, 84, 71], la grieta se propaga en los planos de clivaje que tienen bajas energías superficiales³²: (111) y (110) [34, 84, 88], la propagación inicial recta de la grieta genera una superficie de fractura lisa [18, 66, 84, 88, 71], la velocidad de propagación de la grieta presenta valores mínimos del orden del 1% c_R [21]; pero también se advierten algunas *aparentes* [8] discrepancias: la grieta no se propaga en los planos de clivaje con igualdad facilidad en cualquier dirección³³ [34], la velocidad de la grieta terminal presenta valores inferiores a la velocidad de onda Rayleigh [18, 66, 21, 18, 88], la presencia de una inestabilidad en una velocidad crítica [18, 35], la transición de liso a rugoso en las superficies de fractura [18, 66, 88].

Al analizar otros materiales se aprecian, igualmente, coincidencias —por ejemplo: la forma funcional y la resistencia de los campos de esfuerzos fuera de la *zona de*

³⁰ En los anillos originales de 6 átomos del silicio se daba una transformación en anillos dobles de 5 y 7 átomos.

³¹ Otras influencias son las variaciones en los flujos de energía y los cambios en los campos de esfuerzos asintóticos [10, 80].

³² Esta conclusión se deduce del criterio de Griffith [34].

³³ Del criterio de Griffith se concluye que una grieta en un plano de clivaje se propaga con igual facilidad en cualquier dirección [34].

proceso [8]– [80] y al *parecer* [8] diferencias –tal y como se mencionó en la pág. 10– entre estas técnicas, con lo cual ciertos investigadores (ver comentarios en [33], [10] y [60]) mencionan que la teoría actual se encuentra limitada³⁴ e incompleta, aunque otros [8] indican que los contrastes no son tan grandes y que sólo se necesita información complementaria –proveniente de experimentos o de otras teorías planteada(o)s en escalas muy pequeñas– y adecuaciones mínimas [35, 8, 46] para mantener el poder predictivo de la teoría (por ejemplo: establecer Γ en función de la velocidad, incluso en materiales frágiles como silicio, a diferencia de la constante asumida; y al analizar la fractura más allá de la velocidad de inestabilidad –en la que se generan estados de múltiples grietas– hacerlo sólo durante los momentos en los que se produce estados de una sola grieta [64].).

En lo que sí existe un amplio consenso entre los investigadores [8] es en que el problema de cómo se quiebran las cosas a nivel atómico se aborda mejor a través de simulaciones de dinámica molecular, pues ésta herramienta funciona como un *punte* entre los experimentos y las teorías. De ahí que en el presente trabajo se haya seleccionado esta técnica para analizar la fractura dinámica –principalmente, la morfología de las superficies de fractura– dentro de la *zona de proceso* de muestras nanométricas ideales de silicio. En el siguiente capítulo, se comentan los elementos fundamentales para realizar dichas simulaciones.

³⁴ Los procesos disipadores de energía que se presentan en la *zona de proceso* no son analizados por la teoría del continuo.

CAPÍTULO 3

SIMULACIÓN DE LA FRACTURA POR DINÁMICA MOLECULAR

3.1. Introducción

La técnica de simulación por dinámica molecular ha sido descrita en diferentes textos y artículos (Allen & Tildesley [26], Hoover [27], Haile[28], Rapaport [29], Frenkel & Smit [30], Abraham [25], entre otros). Sin embargo, para tratar específicamente el fenómeno de la fractura es necesario el ajuste de algunos aspectos, estos se desprenden de las investigaciones mencionadas en el apartado anterior¹. En este capítulo se precisan las adecuaciones pertinentes que permiten efectuar, en una estación de trabajo, simulaciones de la propagación de la fractura en materiales nanométricos frágiles durante escalas de tiempo del orden de picosegundos.

¹ Y de aquellas investigaciones no relacionadas con silicio [22, 65, 15, 79, 17, 55, 20, 53, 31, 12, 10, 80].

3.2. Ecuaciones de movimiento

En el análisis computacional de situaciones fuera de equilibrio es frecuente la implementación de simulaciones por dinámica molecular mediante procedimientos llamados *métodos de no equilibrio*, los cuales empezaron a desarrollarse a partir de 1975 [93]. Estos consisten en aplicar una fuerza externa al sistema simulado, para establecer el estado fuera de equilibrio, y luego, a través de la simulación determinar la respuesta a esa fuerza.

La aplicación de estas técnicas ha permitido la determinación de coeficientes de viscosidad, de difusión, de conductividad térmica [94] y, a raíz de la investigación de Holian & Ravelo [53], también se han utilizado para analizar el fenómeno de la fractura.

De manera general, las ecuaciones de movimiento (incluyendo la perturbación) tienen la siguiente forma [26, pág. 241]:

$$\dot{q} = p/m + \mathcal{A}_p \cdot \mathcal{F}(t) \quad (3.1)$$

$$\dot{p} = F - \mathcal{A}_q \cdot \mathcal{F}(t) \quad (3.2)$$

donde:

- \dot{q} \Leftrightarrow Derivada de las coordenadas Cartesianas de cada átomo en el sistema con respecto al tiempo.
- p \Leftrightarrow Momento atómico.
- m \Leftrightarrow Masa atómica.
- $\mathcal{F}(t)$ \Leftrightarrow Componente vectorial $3N$, que representa un campo dependiente del tiempo (aplicado a cada átomo y en cada una de las direcciones).
- \mathcal{A}_p y \mathcal{A}_q \Leftrightarrow Funciones de las posiciones y de los momentos de las partículas que describen la manera en que el campo interactúa con los átomos.
- \dot{p} \Leftrightarrow Derivada del momento atómico con respecto al tiempo.
- F \Leftrightarrow Fuerza en el átomo (sección 3.3, página 24).

La evolución temporal del sistema se simula al calcular las trayectorias y las velocidades atómicas en función del tiempo, mediante la resolución del conjunto de $6N$ ecuaciones diferenciales de primer orden (ecuaciones 3.1 y 3.2) a través de algún método de diferencias finitas (sección 3.4, página 26); inicialmente, al sistema se le asigna una configuración básica.

3.3. Leyes de fuerza

Los fundamentos físicos en las simulaciones computacionales de sistemas sólidos provienen de las leyes de energía y de fuerza utilizadas [95]. Las leyes energéticas se representan por las ecuaciones utilizadas para calcular la energía del sistema en una configuración dada de los átomos. De las energías interatómicas –a través del teorema de fuerza [96]– se determinan las fuerzas internas actuantes en cada átomo.

En principio, las leyes que gobiernan la conducta de los iones y electrones en un sólido (fluido o molécula) son bien conocidas: es suficiente con resolver la ecuación de Schrödinger. El reto es encontrar la solución precisa para cualquier material sólido; esto es complejo, debido a la gran cantidad de iones y electrones que lo conforman. Por este motivo, y con la finalidad de lograr su posible aplicación en simulaciones, se utilizan algunas simplificaciones y aproximaciones, entre las principales [97] se encuentran la consideración de que los núcleos están en posiciones fijas², lo que reduce el problema inicial *multi-cuerpos* a la determinación de la solución de la dinámica de los electrones para una configuración inmovilizada de los núcleos; así como asumir que la fuerte interacción que se tiene en el gas de electrones (en la presencia de los núcleos) se puede trazar como un problema de una sola partícula que se mueve en un potencial efectivo no local, ésta última se apuntala en la teoría del funcional de densidad (DFT) [97].

² Esta simplificación se basa en que los núcleos tienen mayor masa que los electrones. Y conlleva a la separación de las coordenadas electrónicas de las nucleares en la función de onda *multi-cuerpos*, aproximación conocida como Born-Oppenheimer o adiabática.

A la vez, dentro de la DFT [98] se suele considerar a la aproximación de densidad local (LDA) [99] como la metodología más precisa para calcular las energías atómicas y las fuerzas del problema anterior. Sin embargo, y a pesar de los recientes desarrollos (ver [100, 97] y las referencias ahí citadas) relativos a esta metodología, no se ha logrado –hasta el día de hoy– [95] su implementación práctica³ para estudiar sistemas conformados por miles de átomos.

Un método mecano-cuántico simplificado para tratar sistemas sólidos es el Tight-Binding (TB). La aproximación clave del método es asumir que los electrones no interactúan [95], electrón independiente [101], con lo que los efectos de correlación e intercambio de *multi-cuerpos* se consideran sólo en un modo eficaz. Esto reduce el problema a encontrar el espectro de eigenvalores E^n de un Hamiltoniano para *una-partícula*, lo que permite obtener la energía total de la parte electrónica –Energía de la estructura de bandas (E_{bs})— al sumar los eigenvalores E^n . La matriz Hamiltoniana se forma con orbitales atómicos localizados⁴ y la magnitud de las interacciones de los orbitales varía con la distancia. La energía total del sistema se conforma por la E_{bs} y la energía repulsiva (E_{rep}), donde esta última se genera por la repulsión ejercida entre todos los pares de átomos del sistema. Sin embargo, aún y con las simplificaciones de esta técnica que resultan en un cálculo 100 veces más rápido que con la DFT [95], es inmanejable para una terminal de trabajo de escritorio.

Ante estos escenarios se recurre a potenciales empíricos para abordar la física de los sistemas analizados. En esta técnica la energía se expresa como una función de las posiciones interatómicas (con lo cual se desconoce la naturaleza mecano-cuántica de los electrones⁵), lo que deriva en un cálculo 10^4 veces más rápido que al utilizar métodos TB [95]. El procedimiento se basa en que cualquier función de la energía potencial Φ que describe las interacciones entre N partículas idénticas se puede

³ En estaciones de trabajo de escritorio.

⁴ La parte angular de estos orbitales tienen la forma Slater-Koster [102], con parámetros determinados a raíz de cálculos de DFT o bien con base a experimentos.

⁵ Esto, comúnmente, suscita el cuestionamiento de esta alternativa [35, 33].

resolver en contribuciones de un cuerpo, de dos cuerpos, de tres cuerpos, etcétera:

$$\Phi(1, \dots, N) = \sum_i v_1(i) + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}} v_2(i, j) + \sum_{\substack{i,j,k \\ i < j < k}} v_3(i, j, k) + \dots + v_N(i, \dots, N). \quad (3.3)$$

donde v_1 describe normalmente fuerzas externas a las que el sistema está sujeto, los restantes términos v_2, v_3, \dots, v_N representan interacciones de partículas. El término v_2 representa el potencial entre pares de átomos, éste es el más importante de Φ ; el término v_3 representa el potencial que involucra tres átomos, es significativo sobretodo en líquidos y en sólidos tetraédricos covalentes; los términos v_4, v_5, \dots, v_N son pequeños comparados con v_2 y v_3 [26, pág. 7–9].

En la naturaleza de los potenciales empíricos se consideran de manera casi universal los conceptos del apareamiento atómico (en inglés *pairwise*) y de fuerzas centrales [103]. Estos términos implican que la energía potencial entre dos átomos no es influida por la presencia de otros átomos cercanos y que la fuerza entre los átomos se dirige a lo largo de la línea que une los centros de masa, respectivamente. Así, los potenciales suelen ser funciones, únicamente, de la separación atómica.

La construcción de los potenciales empíricos se hace recurriendo a parámetros ajustables que se determinan al relacionar las propiedades de los sistemas con resultados experimentales.

3.4. Integración de las ecuaciones de movimiento

Existen varios algoritmos que se pueden emplear para integrar las ecuaciones de movimiento, entre los más comunes se encuentran el algoritmo Verlet [26, pág. 78–82] y el algoritmo Gear predictor-corrector [26, pág. 82–83]. De acuerdo a Allen y Tildesley [26, pág. 342] es, probablemente, este último algoritmo el más adecuado en los casos donde la velocidad aparece en el lado derecho de las ecuaciones de movimiento (como usualmente sucede en las ecuaciones de movimiento fuera de equilibrio). La

idea básica del algoritmo predictor-corrector es usar la información de la posición (r) y sus primeras n derivadas en el tiempo t (v , a , b , ...) para predecir la posición y sus primeras n derivadas en el tiempo $t + \Delta t$.

$$\begin{aligned}
 r^p(t + \Delta t) &= r(t) + v(t) \Delta t + \frac{1}{2}a(t) \Delta t^2 + \frac{1}{6}b(t) \Delta t^3 + \dots \\
 v^p(t + \Delta t) &= v(t) + a(t) \Delta t + \frac{1}{2}b(t) \Delta t^2 + \dots \\
 a^p(t + \Delta t) &= a(t) + b(t) \Delta t + \dots \\
 b^p(t + \Delta t) &= b(t) + \dots
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Luego, se calculan las fuerzas (y por lo tanto las aceleraciones, $a^c(t + \Delta t)$) en las posiciones predichas. Debido a que estas aceleraciones (a^c) no son iguales a las predichas (a^p), se tienen que ajustar las predicciones:

$$\Delta a(t + \Delta t) = a^c(t + \Delta t) - a^p(t + \Delta t) \tag{3.5}$$

para que correspondan a los hechos.

Además, y con base en la discrepancia observada entre las aceleraciones predichas y las observadas, se mejoran los estimados de las posiciones y las restantes $n - 1$ derivadas.

$$\begin{aligned}
 r^c(t + \Delta t) &= r^p(t + \Delta t) + c_0 \Delta a(t + \Delta t) \\
 v^c(t + \Delta t) &= v^p(t + \Delta t) + c_1 \Delta a(t + \Delta t) \\
 a^c(t + \Delta t) &= a^p(t + \Delta t) + c_2 \Delta a(t + \Delta t) \\
 b^c(t + \Delta t) &= b^p(t + \Delta t) + c_3 \Delta a(t + \Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

La idea es que $r^c(t + \Delta t)$, $v^c(t + \Delta t)$ y sucesivas derivadas son mejores aproximaciones a las posiciones, velocidades, ... verdaderas. Los valores de los diferentes coeficientes c_0 , c_1 , c_2 , c_3 , ... empleados para obtener la óptima estabilidad y precisión de las trayectorias dependen de las derivadas de la posición incluidas y del orden de las ecuaciones diferenciales a resolver.

3.5. Condiciones de frontera

Los sistemas analizados en simulaciones de dinámica molecular son, usualmente, truncados a un tamaño tal que se puedan manejar computacionalmente. Esto resulta en la introducción de fronteras artificiales, las cuales deben tomar en cuenta los átomos que han sido removidos del sistema [52].

La selección de una condición de frontera en particular depende de la situación física que se desea simular [28, pág. 12], por ejemplo:

- Si se desea simular un sistema perfecto infinito, entonces se pueden utilizar condiciones de frontera periódicas en el análisis del movimiento de N partículas en una celda computacional de volumen V , bajo densidad constante.
- Si el objetivo es estudiar la conducta de N partículas en una celda computacional de volumen V cercanas a las paredes reales de un contenedor, entonces se pueden utilizar condiciones de frontera rígidas.

Para el caso de las simulaciones en la mecánica de la fractura se utilizan diversas condiciones de frontera, entre éstas se encuentran las siguientes:

- Aplicar un esfuerzo constante y uniforme a lo largo de la frontera de la muestra que contiene la grieta microscópica. Esta condición presenta el inconveniente de que la simulación no corresponde al caso de una grieta macroscópica y tampoco a la situación de una grieta rodeada por una cantidad razonable de material [103, pág. 27].
- Ordenar los átomos en la frontera de acuerdo a la solución dada por la teoría lineal del continuo apropiada al tipo de defecto y esfuerzo aplicado, y luego estudiar la conducta dentro del sistema (en el que, por lo general, no es válida la teoría lineal) mediante la simulación. En este método, conocido como condición de frontera fija, el volumen del sistema no varía [103, pág. 27].

- Emplear una función continua lineal de Green que relaja las fuerzas entre el continuo y la región atómica, esto mejora la condición de frontera fija, ya que permite pequeños cambios de volumen, aunque no siempre es posible determinar la función de Green del defecto simulado. Una desventaja del método es que éste impone limitantes en el sistema, si los procesos atómicos a observar requieren variaciones en la forma y tamaño del sistema [103, pág. 27–29].
- Manejar la teoría lineal del continuo en la frontera del sistema para determinar los esfuerzos, en lugar de los desplazamientos, de los átomos en la frontera. Entonces, estos esfuerzos se aplican y se mantienen constantes durante la simulación, con lo cual los átomos de la frontera tienen la oportunidad de moverse. El método necesita de un sistema lo suficientemente grande para evitar que la región no lineal alcance la frontera [103, pág. 29].
- Adherir nuevos cristales a la frontera del sistema cercana a la grieta y eliminarlos del sentido opuesto, una vez que la fractura se propaga; con esto se busca simular una grieta en un sistema infinitamente largo [81].
- Añadir una región de amortiguamiento alrededor del sistema a analizar, ésta sirve para prevenir la reflexión de ondas por parte de átomos fijos en ciertas posiciones de la frontera del sistema. Esta condición consiste en aplicar un término extra de fricción ζ a la ecuación de movimiento, tan sólo en la región de amortiguamiento. El valor de ζ se incrementa desde cero en la interfase formada entre la región primaria y la región de amortiguamiento hasta un valor máximo en la frontera del sistema [52].

3.6. Determinación de la energía y de los esfuerzos a nivel atómico

En la ejecución de simulaciones por dinámica molecular se obtienen grandes cantidades de datos –posiciones atómicas y sus derivadas, fuerzas, temperaturas, entre otros– que se incrementan al aumentar el tamaño del sistema analizado y los tiempos de las simulaciones. Sin embargo, estos parámetros no son suficientes en el análisis de fracturas, pues se precisan de energías, esfuerzos y deformaciones a nivel atómico.

La energía atómica se determina calculando dos componentes: la parte potencial y la parte cinética. El segmento potencial se obtiene del potencial mediante las contribuciones $v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, \dots, v_N$ provenientes de los vecinos más cercanos; el segmento cinético proviene de los momentos de las partículas.

Los esfuerzos *atómicos* se definen de acuerdo a la ecuación de esfuerzo virial (esfuerzo atómico instantáneo localizado) [104, pág. 78][105]:

$$\pi_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{V_{\alpha}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta \neq \alpha}^n U'(r^{\alpha\beta}) \frac{\Delta x_i^{\alpha\beta} \Delta x_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} - m_{\alpha} \dot{x}_i^{\alpha} \dot{x}_j^{\alpha} \right\} \quad (3.7)$$

donde V_{α} es un volumen atómico [105, 106], n denota el número de vecinos interactuantes de un átomo α . Esta ecuación es compatible con la propuesta por Vitek & Egami [106], quienes dedujeron la misma ecuación a partir de la naturaleza mecánica cuántica de los sistemas. Una variante de esta ecuación ha sido usada por Buehler *et al.* [80] en un estudio de la fractura dinámica.

CAPÍTULO 4

MOTIVACIÓN E HIPÓTESIS

El concepto para la elaboración de esta investigación emana de un trabajo previo [36], realizado en el tema de la autoafinidad de superficies de fractura. Durante el desarrollo de aquella investigación, se ideó que la autoafinidad, al igual que otras características de la fractura, estaría vinculada al potencial interatómico (pensamiento que concuerda con lo establecido recientemente por Babinec [107]).

Con la idea de analizar la influencia de las interacciones atómicas en el fenómeno de fractura, se pensó en ejecutar simulaciones de dinámica molecular, debido a que el fundamento de esta herramienta resulta ideal para alcanzar este objetivo. La unión de los posibles resultados de esta técnica con la noción de autoafinidad [36, 45] conllevó a plantear la hipótesis del presente trabajo: La simulación por dinámica molecular de la fractura dinámica, producida por tensión, en muestras ideales nanométricas de silicio genera superficies que presentan características de fragilidad similares a las observadas en escalas macroscópicas.

Para validar la hipótesis, se simuló la aplicación de una carga en alta velocidad por tensión uniaxial –a través de las ecuaciones de movimiento propuestas por Zhou *et al.* [12]– que generaba la fractura dinámica en pequeñas muestras (del orden de los diez nanómetros cúbicos) preagrietadas, que contaban con una condición de frontera

de reciente formulación [52] y una temperatura inicial preasignada. El material se modeló mediante tres diferentes potenciales interatómicos [51, 33, 49] –con la finalidad de analizar la influencia del potencial en la propagación de la grieta¹–, y con tres diferentes planos cristalográficos para la propagación de la grieta –con el objetivo de examinar la anisotropía durante la propagación de la fractura [34]–.

El análisis de las superficies y los arreglos estructurales de la fractura se efectuaron en referencia a la morfología generada [67, 84]². También, se estimó la velocidad promedio de la propagación de la grieta [67], y en distintos pasos de tiempo de la simulación se cuantificaron las energías [12], la velocidad instantánea de la punta de la grieta (v_{punta}) [12], los esfuerzos [104] y las deformaciones atómicas [104].

Sin embargo, durante el transcurso de la presente investigación se observó que la formulación de Zhou *et al.* [12] no era apropiada para evaluar la $v(G)$ en estados estables –como se realiza en experimentos y simulaciones (ver sección 2.3 y subsección 2.4.2.1)–, aunque si lo era para evaluar la hipótesis.

¹ En la sección 3.3 se comentó la importancia de éste parámetro, y en la sub sección 2.4.2.1 se mencionaron resultados de simulaciones anteriores de la fractura de muestras de silicio que mostraban ductilidad [84, 71, 50, 35] o fragilidad [81, 34, 84, 88, 71, 50], según el potencial seleccionado.

² La falta de un análisis cuantitativo [36, 15, 108, 109, 110] se debió a que las muestras eran muy pequeñas, con un número muy limitado de datos.

CAPÍTULO 5

EL MODELO

El punto de partida para las simulaciones realizadas en este trabajo fue la generación de coordenadas para los núcleos de los átomos de silicio, esto se hizo a través de la réplica tridimensional de una celda ideal unitaria cúbica centrada en las caras (fcc) tipo diamante. Luego, a ese sistema inicial se le giró en 3 maneras diferentes, con lo que se tuvieron los siguientes sistemas: $(110)[\bar{1}\bar{1}0]$ –similar a $[81]$ –, $(100)[0\bar{1}0]$ –análogo a $[111]$ – y $(111)[10\bar{1}]$ –semejante a $[81]$ –, esto con la finalidad de analizar diferentes escenarios en la propagación de la grieta. Las muestras tuvieron las dimensiones de longitud (L) en $x \times$ altura (H) en $y \times$ espesor en $z = 69 \times 54 \times 22 \text{ \AA}^3$, $65 \times 55 \times 22 \text{ \AA}^3$, y $69 \times 57 \times 20 \text{ \AA}^3$, respectivamente.

Posteriormente, a esas muestras se les realizaron muescas horizontales, paralelas al plano (x,z) , con el objetivo de propiciar la propagación de las fracturas. Los tamaños (l_m) de éstas fueron equivalentes al 40% de la longitud de los especímenes en la dirección x , para efectuarlas se removieron –desde el extremo derecho hacia el centro de las respectivas muestras– 2, 3 y 2 planos de átomos. De esta manera, las muestras contuvieron 3912, 3716, y 3792 átomos, respectivamente.

Para modelar el comportamiento físico de las muestras generadas se precisaba de una ley de fuerza para las partículas constituyentes. Inicialmente, se implementó la

metodología TB (sección 3.3), pero debido a los tamaños de las muestras se obtenía –en la estación de trabajo disponible– un *colapso* al intentar efectuar las simulaciones de Dinámica Molecular (DM) canónicas [26, pág. 230] que asignarían las temperaturas (T) iniciales. Por eso se recurrió a potenciales empíricos, que en el caso del silicio son abundantes¹, con diversas formas y parámetros.

El potencial que se consideró para asignar la temperatura fue el llamado Stillinger-Weber (SW) [51] (tabla A.1), el cual es muy popular y recurrente en la literatura [33], presenta excelentes propiedades elásticas, pero principalmente se tiene reportado que este potencial captura bien la física no lineal involucrada en el calentamiento y la fusión [33].

A través de simulaciones de DM canónicas, desarrolladas durante 20,000 pasos de tiempo² (20.4 ps), se asignaron 2 temperaturas iniciales (100 & 300 K) a cada una de las 3 muestras.

Para la simulación de la fractura se recurrió nuevamente al potencial SW, aunque con ciertas reservas, ya que en un trabajo previo –realizado por Holland y Marder [33]– en el que se empleó este potencial, no se observó la fractura en los planos de propagación (111) y (110), en tanto que en el (100) se tuvo una fractura muy rugosa; esto no concuerda con lo que se presenta en los experimentos [66, 67, 113], ya que en éstos se presenta clivaje frágil en los planos (111) y (110), mientras que en el plano (100) no existe evidencia concluyente [114].

Ante estos resultados, se probaron otros dos potenciales empíricos, con la idea de que alguno generara superficies de fractura con características de fragilidad similares a las observadas en escalas macroscópicas [18, 66, 67, 73].

El siguiente potencial (MSW1) que se utilizó, se desprende del trabajo previamente mencionado de Holland y Marder [33]. Este potencial [33] se basa en el

¹ Se tienen documentados, por lo menos, 30 diferentes potenciales [33, pág. 797][112].

² 1 paso de tiempo = 1.02 fs, este valor fue manejado por Holland [81].

potencial original SW, pero con una modificación en el valor del parámetro λ (tabla A.1), lo que aumenta la estabilidad de los tetraedros que conforman la estructura cristalina fcc tipo diamante, sin embargo, este cambio incrementa la temperatura de fusión arriba de 3,500 K (experimentalmente [33] se conoce en 1,685 K) y aumenta los valores del módulo del Young con respecto a los valores experimentales: un 32 % para el plano (100), un 12 % para el plano (110) y un 7 % para el plano (111).

El último potencial (MSW2) que se manejó fue propuesto por Jian *et al.* [49]. Este potencial, también, consiste en una modificación de los valores de los parámetros del potencial original SW (tabla A.1) que genera un mejor acuerdo de los valores del módulo volumétrico (bulk modulus B) y de las relaciones de dispersión de fonones³ ($\nu_0(\Gamma)$ y $\nu_{TA}(X)$) obtenidos por simulaciones con aquellos observados en los experimentos; esto genera una mejor descripción de la dinámica de la red cristalina [49].

Establecidos los potenciales (SW, MSW1 y MSW2), se analizaron las ecuaciones de movimiento que pudieran generar una propagación de la fractura durante las simulaciones, y entonces se seleccionaron aquellas propuestas por Zhou *et al.* [12]:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} + \dot{\varepsilon}y\hat{\mathbf{y}} \quad (5.1)$$

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{F}}{m} - \dot{\varepsilon}v_y\hat{\mathbf{y}} - \zeta\mathbf{v} \quad (5.2)$$

donde $\dot{\varepsilon}$ es la velocidad de deformación y ζ es un coeficiente de fricción [52], o coeficiente de amortiguamiento viscoso [31], que se aplica a una región alrededor de la zona de simulación primaria.

Estas ecuaciones permiten modelar una expansión homogénea [53] de muestras en la dirección y , sin control de temperatura, lo que favorece el inicio de la fractura y su consecuente propagación. En las simulaciones se manejó un valor de

³ Cuantos de energía provenientes de las vibraciones de las redes atómicas, véase [115, pág. 109].

$\dot{\epsilon} = 0.004 \sqrt{\text{eV}/\text{uma}}/\text{\AA}$ ($\dot{\epsilon} = 0.39 \text{ Ts}^{-1}$), el cual ha sido utilizado en anteriores simulaciones de dinámica molecular (mención en [81, pág. 748]).

Para integrar las ecuaciones de movimiento se implementó el algoritmo Gear predictor-corrector (sección 3.4), ya que de acuerdo a Allen y Tildesley [26, pág. 342] este es el algoritmo indicado cuando la velocidad aparece a la derecha en las ecuaciones de movimiento (lo que sucede en este trabajo). Para aplicar este método se emplearon los valores de $c_0 = 251/720$, $c_1 = 1$, $c_2 = 11/12$, $c_3 = 1/3$ y $c_4 = 1/24$ para los coeficientes de corrección, pues según Allen y Tildesley [26, pág. 341] éstos son los valores sugeridos cuando se tienen ecuaciones de movimiento de primer orden y se manejan cuatro derivadas de la posición con respecto al tiempo en el algoritmo Gear predictor-corrector (tal y como se empleó en esta investigación).

Las condiciones de frontera se implementaron siguiendo la reciente metodología propuesta por Yang *et al.* [52], ya que a través de ésta se pueden absorber las reflexiones de fonones –ver pág. 29–. Se pensó en esta técnica porque durante la propagación de la fractura se tiene una producción destacada de fonones, y como las muestras son nanométricas este efecto podría verse reflejado –hacia el interior de las muestras– por los átomos fijos en las fronteras de las piezas, lo que alteraría la fractura del material. Para implementar estas condiciones de frontera se añadió alrededor de las muestras una zona de amortiguamiento, para esto se manejó el término de fricción ζ en la ecuación de movimiento (ecuación 5.2). El valor de ζ se incrementó desde cero en la interfase formada entre la región primaria y la región de amortiguamiento hasta un valor máximo ($0 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$ o $0.0002 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$ o $0.002 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$ o $1 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$, según el caso simulado) en los límites de esta zona [52].

En las direcciones x y y se aplicaron las anteriores condiciones de frontera, en tanto que en la dirección z se implementaron condiciones periódicas; con esto se tuvo

una situación de deformación plana^{4,5}.

La implementación de estos elementos (planos de propagación de la fractura, tamaños de las muestras, número de átomos, potenciales empíricos, ecuaciones de movimiento, algoritmo de integración y condiciones de frontera), aunados a los componentes clásicos de la dinámica molecular [26], en programas realizados en *fortran*⁶ permitieron la simulación de la deformación y de la consecuente fractura de las muestras. Las condiciones iniciales y de frontera utilizadas en las simulaciones se reportan en la tabla 5.1 .

Para analizar los procesos de fractura simulados se obtuvieron, cada 500 pasos de tiempo, datos de posición, energía, deformación y esfuerzos a nivel atómico (sección 3.6). A éstos se les aplicó una posterior discretización, para asignarles un color característico [12] acorde a la magnitud de sus valores, con el propósito de obtener una mejor visualización de los fenómenos⁷ (ver capítulo 6). Adicional a esto, se calculó la velocidad promedio de la grieta (v_{prom}), definida como la relación entre el camino de la grieta, $L - l_m$, y la duración del proceso de fractura [67]; así como la velocidad instantánea de la punta de la grieta, determinada como el cambio en la posición x de la punta de la grieta dividida por el intervalo de tiempo de recopilación de datos [12].

En el siguiente capítulo se efectúa la validez de la hipótesis, esto se hace al comparar los resultados obtenidos –principalmente, la morfología de las superficies de fractura– con aquellos provenientes de macro experimentos y de otras simulaciones.

⁴ Estado de esfuerzos donde una dimensión es “infinita”, por lo tanto, la deformación a lo largo de esa dirección está restringida, véase [59, pág. 52] [116, pág. 41].

⁵ Esta limitante puede influir en la posibilidad de la nucleación de dislocaciones [35].

⁶ Se utilizaron 3,500 pasos de tiempo (3.57 ps) para la propagación de la fractura en el plano (111), en tanto que en los planos (110) y (100) se manejaron 7,000 pasos de tiempo (7.14 ps).

⁷ Se utilizó XMakemol [117] como herramienta de visualización.

Tabla 5.1: Condiciones iniciales y en la frontera para las diversas simulaciones.

Caso	Átomos	Potencial	Plano de la fractura	Tempe- ratura inicial	Velocidad de defor- mación ($\dot{\epsilon}$)	Condición en la frontera	Pasos de tiempo ⁷
A	3912	MSW1	(110)	100 K	0.004 ⁸	9,10	7000
B	3716	"	(100)	"	"	"	"
C	3792	"	(111)	"	"	"	3500
D	"	"	"	"	"	9,11	"
E	3716	"	(100)	"	"	"	7000
F	"	"	"	"	"	9,12	"
G	3792	"	(111)	"	"	"	3500
H	3903	"	(110)	300 K	"	9,10; 9,11; 9,12	7000
I	3714	"	(100)	"	"	9,10	"
J	3791	"	(111)	"	"	"	3500
K	3714	"	(100)	"	"	9,11	7000
L	3791	"	(111)	"	"	9,12	3500
M	3716	MSW2	(100)	100 K	"	9,10	7000
N	3912	SW	(110)	"	"	"	"
O	3716	"	(100)	"	"	"	"
P	3792	"	(111)	"	"	"	3500

⁷ 1 Paso de tiempo = $1.018050697 \times 10^{-15}$ s .

⁸ La unidad utilizada es $\sqrt{eV}/\text{uma}/\text{Å}$, equivalente a 9.822694×10^{13} s⁻¹ .

⁹ Se aplicaron condiciones periódicas en la dirección z .

¹⁰ En la frontera derecha e izquierda de la muestra se implementó una celda amortiguadora a lo largo del plano $y - z$, con un coeficiente máximo igual a $0.002 \sqrt{eV}/\text{uma}/\text{Å}$.

¹¹ En la frontera derecha e izquierda de la muestra se implementó una celda amortiguadora a lo largo del plano $y - z$, con un coeficiente máximo igual a $0.0002 \sqrt{eV}/\text{uma}/\text{Å}$.

¹² En la frontera derecha e izquierda de la muestra no se implementó algún tratamiento.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

6.1. Introducción

En este capítulo se reportan y se discuten los resultados encontrados en las simulaciones efectuadas de la propagación de la fractura dinámica en silicio. En los sucesivos comentarios se enfatiza el efecto de las condiciones de frontera e iniciales en las morfologías, estructuras y velocidades de las grietas detectadas. Igualmente, se mencionan las coincidencias y las divergencias advertidas en los presentes resultados con respecto a los publicados en otros trabajos teóricos, experimentales y de simulaciones. Además, en donde se considera pertinente se sugieren ciertas ideas que podrían contribuir a la comprensión de algunos de los fenómenos vistos en el silicio.

6.2. Morfología de la fractura y estructura

El análisis de las superficies de fractura en las muestras simuladas¹ con los potenciales MSW2 y SW mostró el embotamiento de la fractura (figuras² 6.1a y

¹ Inicialmente a 100 K.

² En éstas y en las siguientes figuras, los átomos presentan un color asociado que sirve únicamente para diferenciar los casos simulados. Salvo aquellas figuras que tienen asociada una escala de colores, que representa los diferentes valores de una determinada magnitud.

6.1b, respectivamente), con un comportamiento dúctil durante toda la simulación. Esto se presentó tanto en la muestra MSW2 para el plano de propagación (100) –caso M de la tabla 5.1– como en las muestras SW para los planos: (110), (100) y (111), casos N, O y P, respectivamente, de la tabla 5.1.

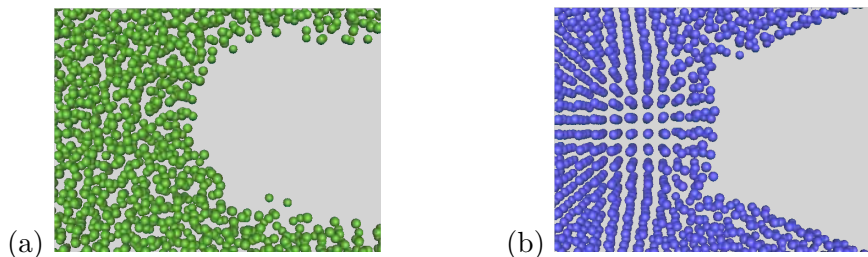


Figura 6.1: Fractura embotada: (a) con MSW2, en (100), a los 1000 pasos de tiempo y (b) con SW, en (110), a los 2500 pasos de tiempo.

Asimismo, la muestra MSW2 –caso M– exhibió la pérdida total de la cristalinidad (figura 6.1a), mientras que la simulada con SW –caso N– mantuvo gran parte de su comportamiento cristalino (figura 6.1b).

Los resultados anteriores del potencial SW en los planos de propagación (111) y (110) –casos P y N– concuerdan con la simulación SW de Holland y Marder [33] –en ese trabajo se emplearon condiciones de frontera y ecuaciones de movimiento diferentes a las del presente estudio–, pero tal y como ellos lo notaron, estos resultados no coinciden con resultados experimentales [50], ni con los productos de otras simulaciones –efectuadas con potenciales distintos al SW– [50, 34, 71], los cuales exhiben una propagación frágil de la fractura. En el caso de la simulación realizada con el potencial MSW2 –caso M– se puede argüir que el plano (100) no es un plano de clivaje del silicio y que no se tiene conocimiento de que este potencial haya sido utilizado para simular la fractura –no obstante, sí reproduce satisfactoriamente algunas propiedades del silicio (ver página 35) [49]–, sin embargo, en una simulación de Holland y Marder [33] realizada con un potencial MSW1 en este plano, sí se presentó la propagación de la fractura.

En las muestras simuladas, a 100 K iniciales, con el potencial MSW1 sí se manifestó la propagación de la grieta:

- En el plano de la fractura (110) –caso A de la tabla 5.1– se apreciaron, en una primera instancia, dos potenciales caminos simétricos para la fractura; éstos presentaron, alrededor de las puntas, pequeñas regiones de marcada deformación (figura 6.2a) [118] Posteriormente, la fractura se fue por uno de estos caminos hacia $[1\bar{1}0]$ (figura 6.2b) ³. Luego, la grieta se propagó generando una superficie *lisa* como espejo (figura 6.2c) –esto podría esperarse, pues como se mencionó en la pág. 41 este plano es el de clivaje en los semiconductores III-V–. Así, la morfología generada resultó acorde a la predicción del PSL (pág. 10), y también, estuvo a tono con la conducta advertida en otras simulaciones [34, 81] y en experimentos de fractura para bajas tasas de liberación de energía G efectuados en probetas de tamaño milimétrico a *temperatura ambiente*⁴ [67].

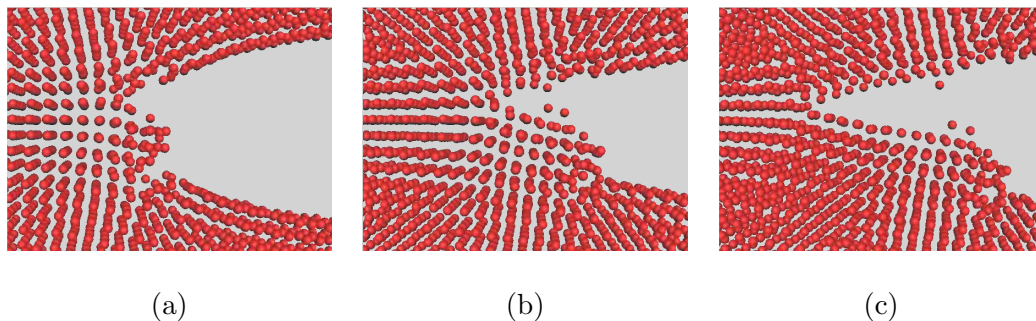


Figura 6.2: Fractura en el plano (110) simulada con MSW1 y 100 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 2500 y (c) 4000 .

- En el plano de la fractura (100) –caso B de la tabla 5.1– se notó, inicialmente, un pequeño cambio en la orientación de la propagación de la fractura (figuras 6.3a y 6.3b), y luego, durante el avance de la grieta hacia $[0\bar{1}0]$ se presentaron ligeras oscilaciones relativas al plano de propagación (100) con lo que se generaron

³ En la sección 6.3 se discute este caso en términos energéticos y de esfuerzos.

⁴ Si bien la temperatura inicial de la muestra simulada (100 K) es diferente a la de las probetas experimentales (298 K), se esperaría que el comportamiento práctico de las probetas fracturadas a las temperaturas de la simulación se mantuviera frágil.

características rugosas (figura 6.3c); una situación análoga fue observada en una simulación de Holland y Marder [33].

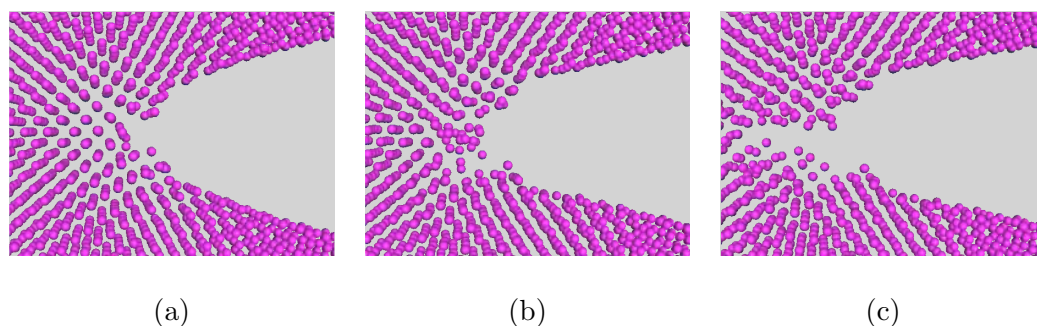


Figura 6.3: Fractura en el plano (100) simulada con MSW1 y 100 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 2500 y (c) 3000 .

- En el plano de la fractura (111) –caso C de la tabla 5.1– se tuvo un comportamiento frágil, tipo clivaje, que generó superficies *lisas* en $[10\bar{1}]$, salvo unos pocos átomos en los que se tuvo un desplazamiento *irregular* (figuras 6.4a, 6.4b y 6.4c) [118] –el comportamiento global podría preverse, pues como se mencionó en la pág. 12 este plano es el de clivaje en el silicio– . Análogas a estas superficies son aquellas reportadas como atómicamente planas en otras simulaciones [71, 88] y las encontradas en experimentos para bajas energías de fractura en probetas de tamaño milimétrico a *temperatura ambiente*⁵ [66, 113].

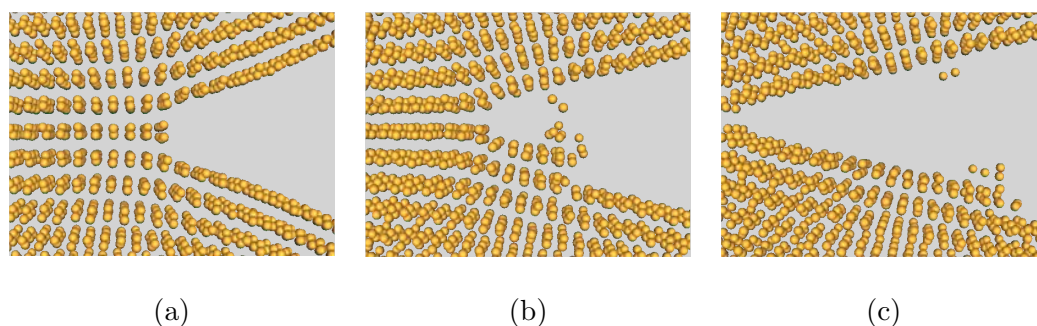


Figura 6.4: Fractura en el plano (111) simulada con MSW1 y 100 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2500 y (c) 3500 .

⁵ Comentario similar al expresado en la anterior nota al pie de página.

Por otra parte, en las muestras simuladas con el potencial MSW1, a 300 K de temperatura inicial, también se manifestó la propagación de la grieta⁶. Pero en algunas de estas simulaciones se produjeron –principalmente, en los pasos finales de las simulaciones– morfologías más complejas que las apreciadas en los casos recién comentados a 100 K iniciales. A continuación, se describen los eventos advertidos:

- En el plano de la fractura (110) –caso H de la tabla 5.1– se presentaron a los 2000 pasos de tiempo, con cualesquiera de las condiciones de frontera utilizadas⁷, dos potenciales caminos para la propagación de la grieta (figura 6.5a) –este panorama también se advirtió en la muestra a 100 K iniciales (caso A, figura 6.2a)– . De ahí en adelante, se observó que la propagación dependía decisivamente de las condiciones de frontera –en la siguiente subsección se detallan esos efectos– ; así en dos de las tres diferentes condiciones de frontera implementadas se obtuvo una propagación fácil de la fractura, con características morfológicas *lisas* –como podría esperarse ya que el presente plano es de clivaje– . A su vez dentro de la fractura frágil se tuvieron dos escenarios: La propagación de la grieta a lo largo de un camino principal recto (figura 6.5b) –análogo a lo observado en experimentos para bajas tasas de liberación de energía G efectuados en probetas de tamaño milimétrico a temperatura ambiente [67] y semejante a lo visto en la muestra simulada a 100 K iniciales (caso A, figura 6.2c)– y la extensión a lo largo de una ruta que exhibía un cambio de la trayectoria recta (figura 6.5c) –distinto a lo advertido en la muestra simulada a 100 K iniciales (figura 6.2c)– ; estas situaciones dependían de la condición de frontera utilizada.

⁶ Para que se generara la propagación de la grieta en algunas muestras a 300 K iniciales se tuvo que ajustar el coeficiente de fricción respecto a los valores utilizados en las muestras a 100 K iniciales.

⁷ Se aplicaron en la dirección z condiciones periódicas, y en el contorno de la muestra se colocó una celda amortiguadora con 3 diferentes valores máximos para el coeficiente de fricción: $0.0002 \text{ A}^{-1} \sqrt{\text{eV}/\text{uma}}$, $0.002 \text{ A}^{-1} \sqrt{\text{eV}/\text{uma}}$ y $0 \text{ A}^{-1} \sqrt{\text{eV}/\text{uma}}$.

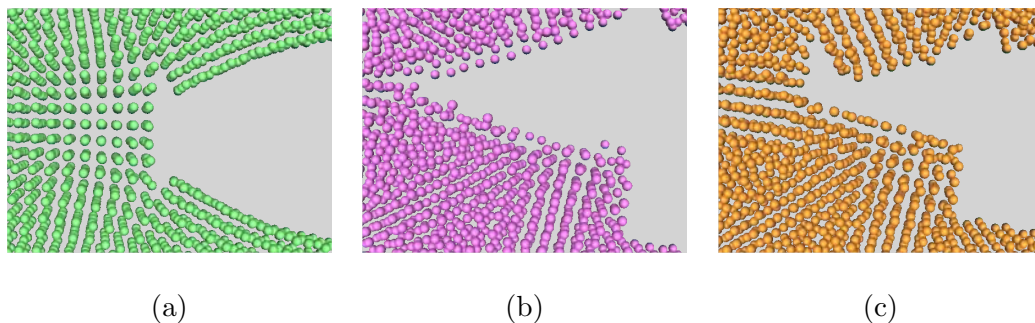


Figura 6.5: Fractura en el plano (110) simulada con MSW1 y 300 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 4500 y (c) 4500 .

- En el plano de la fractura (100) –caso I de la tabla 5.1– se encontró que en los primeros pasos de tiempo la fractura avanzaba de forma oscilatoria en el plano de propagación $[0\bar{1}0]$ (figuras 6.6a y 6.6b) –similar a la muestra a 100 K iniciales (caso B, visto en las figuras 6.3a y 6.3b)– ; pero en los últimos pasos de tiempo, se notó un cambio de trayectoria (figura 6.6c) –no detectado en el caso B (ver figura 6.3c)– .

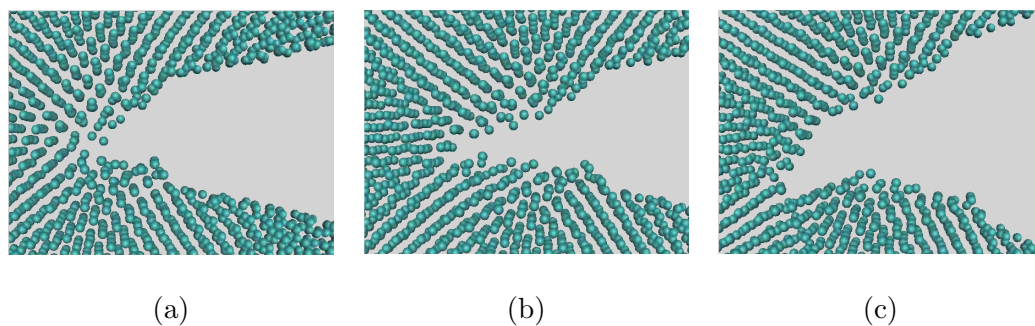


Figura 6.6: Fractura en el plano (100) simulada con MSW1 y 300 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2500, (b) 3000 y (c) 5000 .

- En el plano de la fractura (111) –caso J de la tabla 5.1– sólo se percibió un comportamiento de clivaje en $[10\bar{1}]$ (figuras 6.7a, 6.7b y 6.7c), semejante a lo observado en la muestra simulada a 100 K iniciales (caso C, visto en las figuras 6.4a, 6.4b y 6.4c) y al advertido en experimentos para bajas energías de fractura en probetas de tamaño milimétrico a temperatura ambiente [66, 113].

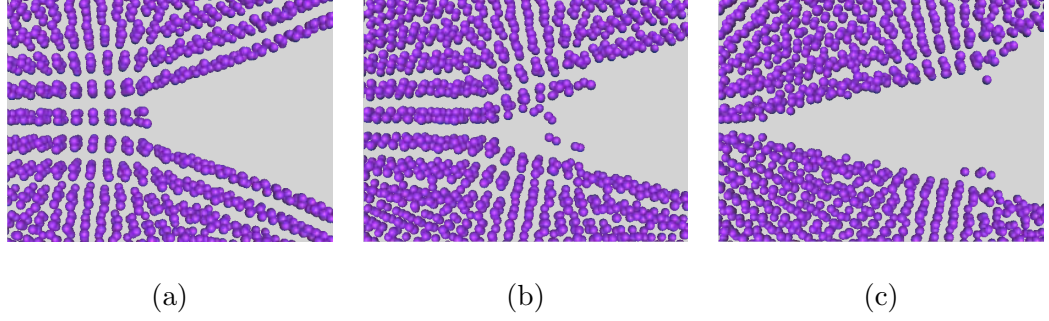


Figura 6.7: Fractura en el plano (111) simulada con MSW1 y 300 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2500 y (c) 3500 .

6.2.1. Amortiguamiento

Para examinar el efecto de las celdas amortiguadoras –dispuestas en el contorno de las muestras–⁸ en la morfología de la grietas, se realizaron simulaciones de fracturas en el plano (111) empleando diferentes valores para el coeficiente máximo de fricción (ζ) de las celdas: $0.002 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$, $0.0002 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$ y $0 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$ –casos C, D y G, respectivamente, de la tabla 5.1–⁹. Los resultados de éstas en muestras MSW1 a 100 K iniciales revelaron lo siguiente:

- En el caso C ($\zeta=0.002 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$), a los 2000 pasos de tiempo se tuvo una deformación no lineal alrededor de la punta de la grieta [8], que se reflejó en un pequeño reacomodo de los átomos cercanos a la punta (fig. 6.8a) –comportamiento, comúnmente, asociado a una conducta dúctil–, aunque en el resto de la simulación sólo se observaron características frágiles durante la propagación en $[10\bar{1}]$ (fig. 6.8b).

⁸ Este tratamiento a la frontera evoca la estructura *core/shell* de nanopartículas, en las cuales el espesor influye en las propiedades de las estructuras [119, 120].

⁹ En un caso extremo se implementó un coeficiente de $1 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$.

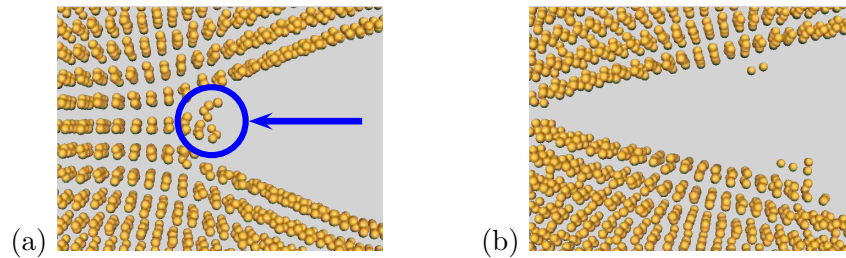


Figura 6.8: Fractura en el plano (111) simulada con MSW1, 100 K iniciales y $\zeta=0.002$, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2000 y (b) 3500 .

- En el caso D ($\zeta=0.0002 \text{ A}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$), a los 2000 pasos de tiempo comenzó la propagación interplanar (111) de la fractura en $[10\bar{1}]$, y luego, a los 2500 pasos de tiempo se dio la extensión de la grieta en un plano por debajo del inicial (figura 6.9a). Durante toda la simulación se advirtió, solamente, un comportamiento frágil (figura 6.9b).

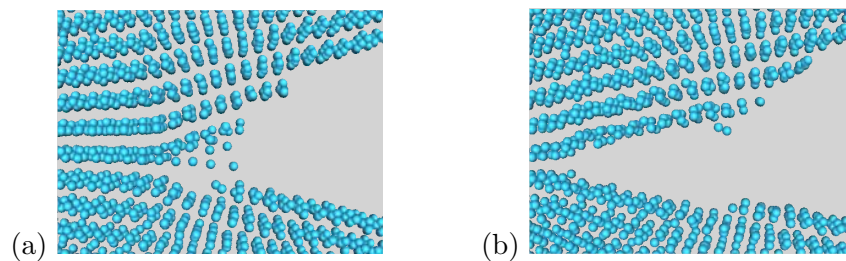


Figura 6.9: Fractura en el plano (111) simulada con MSW1, $\zeta=0.0002$ y 100 K iniciales, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2500 y (b) 3000 .

- En el caso G ($\zeta=0 \text{ A}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$), a los 2000 pasos de tiempo inició la propagación interplanar (111) de la fractura en $[10\bar{1}]$ (fig. 6.10a), y durante la simulación sólo se observó la propagación en el mismo plano y dirección inicial (fig. 6.10b). El comportamiento general observado correspondió a una conducta frágil. En estas figuras se señalan algunos átomos que recuerdan la formación de un cordón de desgarre (en la fig. 36(b) de [121] se observa en escala microscópica este fenómeno en un acero Fe-0.18C-3.85Mo fracturado en altas velocidades de deformación).

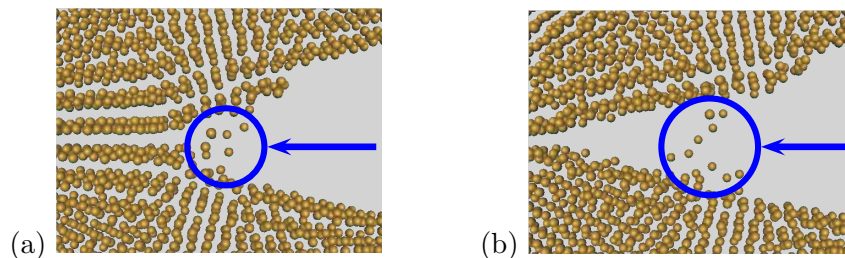


Figura 6.10: Fractura en el plano (111) simulada con MSW1, $\zeta=0$ y 100 K iniciales, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2000 y (b) 3500 .

- En el caso donde se empleó un coeficiente de $1 \text{ A}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$, se tuvo un comportamiento irregular de las muestras, pues se perdió totalmente el orden de largo y corto alcance, antes de que se alcanzaran los 500 pasos de tiempo.

Salvo este último caso, no parece haber algún cambio significativo en la conducta de la grieta al variar los valores del coeficiente de fricción en las muestras a 100 K iniciales¹⁰. Esto, como lo notaron Yang y Li [52], puede deberse a la rápida propagación de la punta de la grieta¹¹.

Sin embargo, en las simulaciones de fractura de muestras MSW1 a 300 K iniciales –en un plano (110)– sí se percibió un cambio en la propagación de la grieta al variar el coeficiente máximo de fricción (ζ): 0.002 ¹² 0.0002 ¹² y 0 ¹² –casos H de la tabla 5.1– . Los detalles advertidos se comentan a continuación:

- En el evento donde se utilizó el coeficiente de $0.002 \text{ A}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$, la grieta se propagó con gran dificultad de modo interplanar (110) hacia $[\bar{1}\bar{1}0]$, ya que se alcanzaron los 7000 pasos de tiempo y la muestra no se había fracturado completamente (fig. 6.11a); esto contrastaba con lo visto en la muestra simulada a 100 K iniciales con el mismo coeficiente de fricción (caso A), pues en

¹⁰ También se analizó el plano (100) bajo los siguientes valores máximos de ζ : $0.002 \text{ A}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$, $0.0002 \text{ A}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$ y $0 \text{ A}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$ que representan los casos B, E y F, respectivamente, de la tabla 5.1. En estos casos tampoco se observaron cambios significativos.

¹¹ Yang y Li, en el trabajo citado, simularon la fractura de cristales cúbicos centrados en el cuerpo de α -Fe, bajo condiciones de frontera similares a las empleadas en este trabajo.

¹² Las unidades son $\text{A}^{-1} (\text{eV/uma})^{1/2}$.

este último caso la fractura ya se había completado en esos pasos de tiempo. Experimentalmente se tiene una fácil propagación de la grieta [67].

- Al utilizar el coeficiente de $0.0002 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$, se tuvo inicialmente una fácil propagación interplanar (110) de la grieta hacia $[\bar{1}\bar{1}0]$, de manera recta; seguida por algunos cambios en la trayectoria: la grieta se dirigió hacia la parte superior de la muestra a través de los planos (110) –aproximadamente a 90° o $(\bar{1}\bar{1}0) [110]$ – (fig. 6.11b), y luego, se enfiló hacia la izquierda –aproximadamente a 45° o $(0\bar{1}0) [100]$ – (fig. 6.11b); estos dos últimos cambios no se percibieron en la muestra simulada a 100 K iniciales (caso A), por lo que las diferencias encontradas podrían asociarse al efecto del coeficiente de fricción. Prácticamente sí se presenta una deflexión del plano original, pero sucede hacia un plano (111) y sólo en altas tasas de liberación de energía G [67].
- En tanto que al emplear el coeficiente de $0 \text{ \AA}^{-1} (\text{eV}/\text{uma})^{1/2}$ se tuvo sólo la fácil propagación recta de la grieta, entre los planos (110), hacia $[\bar{1}\bar{1}0]$ (fig. 6.11c). Esto resultó análogo a lo advertido en la muestra simulada a 100 K iniciales (caso A), aunque en ese caso se empleó otro coeficiente, y también se percibió similitud con la fractura de probetas milimétricas ensayadas a temperatura ambiente en bajas tasas de liberación de energía G [67].

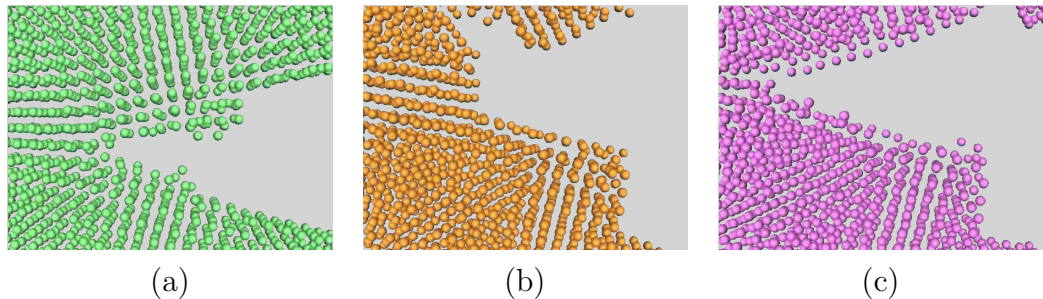


Figura 6.11: Fractura en el plano (110) simulada con MSW1, a 300 K iniciales y diferentes ζ , observada en distintos pasos de tiempo (pt): (a) $\zeta = 0.002$ (6000 pt), (b) $\zeta = 0.0002$ (5500 pt) y (c) $\zeta = 0$ (4500 pt).

6.3. Velocidades de la grieta

En los casos simulados se evaluaron las velocidades promedio (v_{prom}) de propagación de las grietas y las velocidades instantáneas de las puntas de las grietas¹³. Sin embargo, no se pudo registrar $v(G)$ –como se reporta en ciertos experimentos, teorías y simulaciones; ver capítulo 2–, pues en el presente trabajo se implementó un modelo de $\dot{\epsilon}$ constante, en contraste a uno de G constante. La evolución a un modelo de ese tipo es una propuesta para un próximo trabajo (ver capítulo 7).

En la siguiente tabla (6.1) se reportan las velocidades promedios (v_{prom}) obtenidas en muestras a 100 K iniciales simuladas con el potencial MSW1, bajo diferentes condiciones iniciales y de frontera.

Tabla 6.1: v_{prom} en los planos (111), (100) y (110), obtenida en muestras a 100 K iniciales, bajo diferentes condiciones iniciales y de frontera (Casos de la tabla 5.1: C, D, G; B, E, F; y A).

	C (111)	D (111)	G (111)	B (100)	E (100)	F (100)	A (110)
v_{prom} (m/s):	1854	1920	1932	496	526	528	961

Los valores reportados indican que el mínimo de la v_{prom} de propagación se manifestó en el plano (100), ésta se incrementó en el plano de clivaje (110) y el máximo de la v_{prom} se advirtió en el otro plano de fácil propagación (111). Estos resultados concuerdan cualitativamente con algunos obtenidos experimentalmente en materiales cristalinos, pues en estos últimos, la grieta crece en los planos de clivaje a las velocidades límites [7].

De acuerdo a Cramer *et al.* [67] la v_{prom} puede, en un momento dado, aproximarse a la velocidad de estado estable. Si este argumento se diera por verdadero

¹³ Esto se hizo en la mayoría de los casos, no en todos, pues no siempre fue posible la determinación precisa de la posición de la punta de la grieta, debido al carácter 3D del frente de la grieta. Este factor influye [8] en la precisión de los valores reportados.

para los valores reportados en la tabla 6.1, se tendría una perfecta observancia con lo estipulado por la mecánica del continuo ($0 < v < c_R$) [58] y por los experimentos (la v límite práctica superior es $\approx 3825 \text{ m/s} = 0.85 c_R$ ¹⁴ en el plano (110) [72], y en el plano (111) es $\approx 3416 \text{ m/s} = 0.73 c_R$ ¹⁵ [66])¹⁶. Sin embargo, al analizar la velocidad instantánea de la punta de la grieta –precisada en el capítulo 5– en los planos de clivaje (figuras 6.12 y 6.13) se advirtió un comportamiento claramente inestable, que descartó a la v_{prom} como representativa de la velocidad del estado estable [8]. Posiblemente, la causa de que no se haya alcanzado la estabilidad sea el pequeño tamaño, nanométrico, de las muestras (ésta razón ha sido comentada en [15] y [12]).

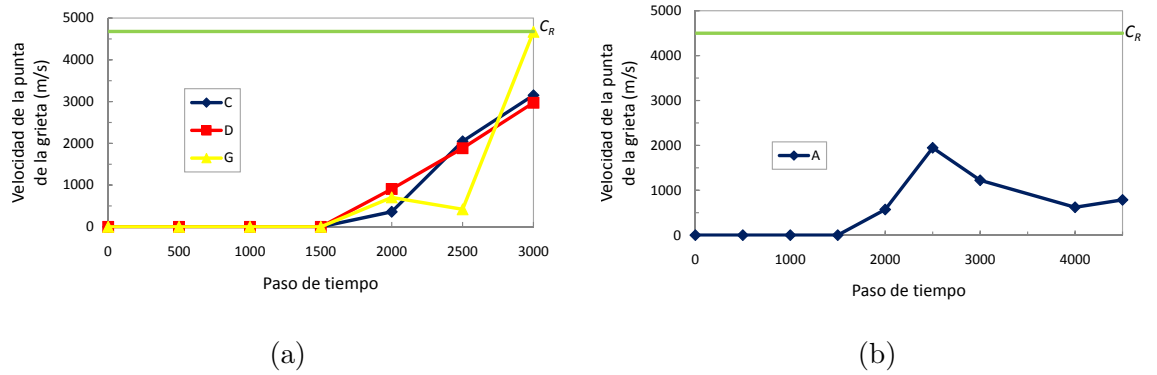


Figura 6.12: Velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano: (a) (111) y (b) (110), en muestras a 100 K iniciales.

Las muestras simuladas con el potencial MSW1 a 300 K iniciales, así como aquellas simuladas a 100 K iniciales, exhibieron valores y tendencias similares en la velocidad promedio (tabla 6.2 y tabla 6.1) y en la velocidad instantánea de la punta de la grieta (figura 6.13¹⁷ y figura 6.12).

¹⁴ $c_{R,(110)} \approx 4.5 \text{ km/s}$ [72].

¹⁵ $c_{R,(111)} \approx 4.68 \text{ km/s}$ [35, 88].

¹⁶ Estos postulados y resultados de la mecánica del continuo y de algunos experimentos se comentaron en las secciones 2.2 y 2.3, respectivamente.

¹⁷ Los valores reportados de las muestras I y H (con el coeficiente de $0.0002 \sqrt{\text{eV}/\text{uma}}/\text{\AA}$), se calcularon antes de que se presentaran las desviaciones en sus respectivas trayectorias rectas (ver páginas 44 y 48, respectivamente).

Tabla 6.2: v_{prom} en los planos (111), (100) y (110), obtenida en muestras a 300 K iniciales, bajo diferentes condiciones iniciales y de frontera (Casos de la tabla 5.1: J, L; I, K; H* [H con el coeficiente de 0.0002], H** [H con el coeficiente de 0]).

	J (111)	L (111)	I (100)	K (100)	H* (110)	H** (110)
v_{prom} (m/s):	1734	1824	517	547	714	885

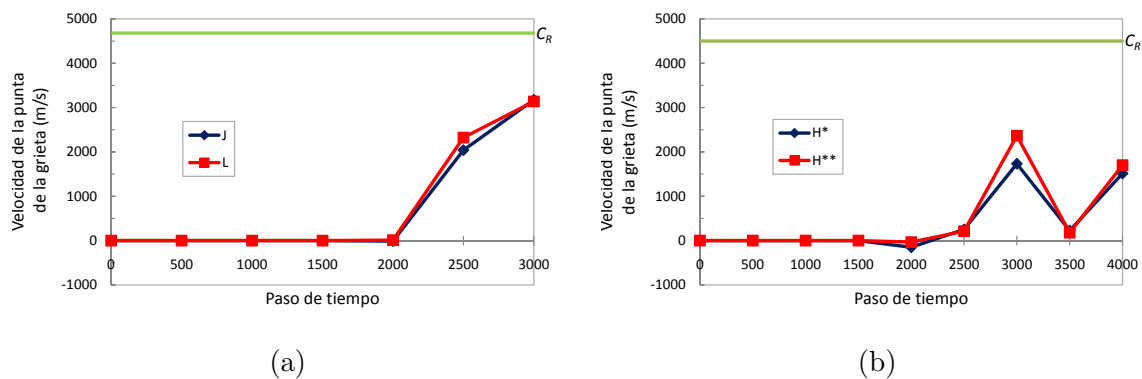


Figura 6.13: Velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano: (a) (111) y (b) (110), en muestras a 300 K iniciales.

No obstante, el comportamiento registrado de la velocidad instantánea de la punta de la grieta en los planos (111) y (110) fue completamente diferente (tanto en las muestras de temperatura inicial baja como en aquellas de temperatura alta), a pesar de que los dos planos son considerados de fácil propagación para la grieta. En los planos (111), la grieta se aceleró uniforme y rápidamente (figura 6.12a y figura 6.13a) dejando tras de sí una superficie lisa; mientras que en los planos (110), la grieta se aceleró y desaceleró al *parecer* de forma oscilatoria (figura 6.12b y figura 6.13b). El primer régimen estuvo de acuerdo a lo observado inicialmente en experimentos de tensión realizados en materiales plásticos frágiles, en los que la grieta se propaga rápidamente [122], y también, con aquellos resultados iniciales de Cramer *et al.* [18] en silicio, y con los producidos al comienzo de las simulaciones de Zhou

et al. [31]; en tanto que el segundo régimen *recuerda* a comportamientos de transición *pinning/depinning* [123, 124]¹⁸, sin embargo, no queda claro qué generaría este comportamiento –tal vez se trate de una acumulación gradual de energía, aunque, esto no se observa en el otro plano de clivaje– ; por lo cual, se argumenta que este comportamiento anómalo sería producto de las condiciones de frontera utilizadas tal y como se reportó en la investigación de Zhou *et al.* [31].

Al analizar la velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano de no clivaje (100) de muestras a 100 K bajo diferentes condiciones de frontera –casos B, E y F de la tabla 5.1– (figura 6.14) se apreció un comportamiento inestable y oscilante –esto último era de presumirse, ya que este plano no es de fácil propagación– . Específicamente, en el caso B se hizo un seguimiento puntual de la velocidad instantánea en diferentes pasos de tiempo –incisos (a), (b), (c), (d), (e) y (f) en la figura 6.14– y de la morfología correspondiente (figura 6.15), notando el reflejo del zigzag de la velocidad en la morfología de la superficie de fractura –un estudio semejante a éste lo realizaron Buehler *et al.* [35], ver páginas 19 y 20– .

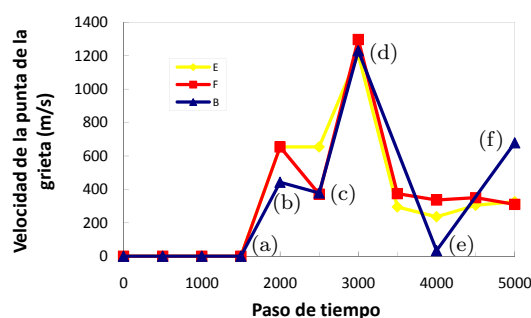


Figura 6.14: Velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano: (100), en muestras a 100 K iniciales.

¹⁸ La transición se manifestó cuando se pasó de una aparente detención de las grietas –*pinning*– hacia un rápido avance de los frentes de las grietas –*depinning*– , durante los cuales se alcanzaban los máximos de velocidad (esto conllevaba a la liberación de una gran cantidad de energía).

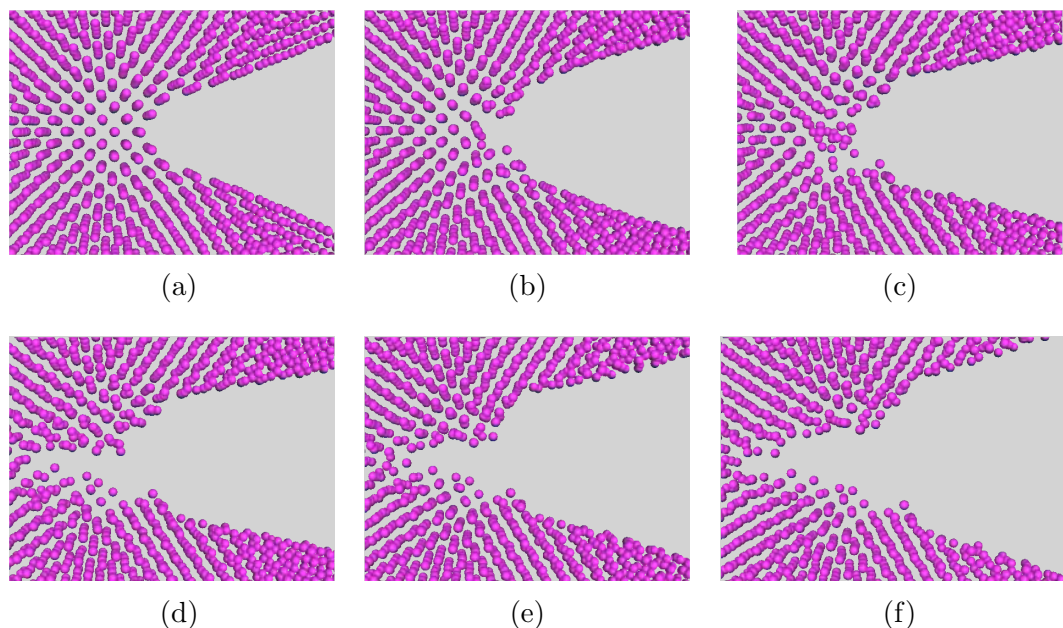


Figura 6.15: Evolución de la punta de la grieta en el plano (100) –caso B–, en diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2000, (c) 2500, (d) 3000, (e) 4000 y (f) 5000 .

También se observó en la mayoría de los casos simulados (figuras 6.12, 6.13 y 6.14) que al iniciarse la fractura se presentaba una aceleración muy aguda –este comportamiento ha sido advertido en otros trabajos, en los que incluso se ha llegado a plantear que al propagarse la grieta se presenta un salto discontinuo en la velocidad [125]– . Sin embargo, en la figura 6.12a se advierte una baja velocidad inicial, del orden de los 350 m/s, lo que permite intuir que al afinar¹⁹ el intervalo de los pasos de tiempo en el que se recaban datos se distinguiría un cambio *continuo* en la velocidad, tal y como lo percibieron Fineberg *et al.* [122] en sus experimentos.

6.4. Energía y esfuerzos

En la sección 6.2, pág. 41, se mencionó que en la simulación de la fractura, en un plano de propagación (110), de una muestra MSW1 a 100 K iniciales –caso A–

¹⁹ En analogía con las mediciones de alta resolución practicadas por Fineberg *et al.* [122].

se presentaba a los 2000 pasos de tiempo dos potenciales caminos simétricos para la propagación de la fractura (ver fig. 6.16a, que reproduce la fig. 6.2a), y que a los 2500 pasos la fractura *decidía* propagarse por una de esas dos rutas (ver fig. 6.16c, que reproduce la fig. 6.2b). Pues bien, en esta sección se analiza la energía y los esfuerzos de los átomos constituyentes con la finalidad de tener parámetros cuantitativos que permitan elucidar el porqué de la *decisión* de la grieta^{20,21}.

En la fig. 6.16b –registrada a los 2000 pasos de tiempo– se observa un gradiente de energía^{22,23} en los alrededores de los potenciales caminos, situación similar a la observada en las simulaciones de Zhou *et al.* [31, 12]. En el camino superior el espectro energético, pareciera, más continuo y amplio que el observado en el camino inferior.

En tanto que en las figs. 6.17a, 6.17b, 6.17c, 6.17d, 6.17e y 6.17f –registradas también a los 2000 pasos de tiempo– se presentan los componentes tensoriales σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yy} , σ_{yz} , σ_{zz} , y el esfuerzo principal σ_1 , respectivamente^{24,25}. En el camino superior se perciben los máximos valores de éstos esfuerzos *atómicos*.

Esos valores nos conducen a postular que la fractura se *debiera* propagar por el camino superior²⁶, lo que efectivamente sucede a los 2500 pasos de tiempo (fig. 6.16c).

²⁰ Un análisis energético similar ha sido empleado por Zhou *et al.* [31], y otros [12, 53].

²¹ En el caso de fracturas rápidas –como es el caso presente– no existe una base rigurosa para postular la dirección de propagación [80]. Los diversos criterios postulados para ese fin se dividen en aquellos donde la grieta se propaga en la dirección de un esfuerzo máximo y aquellos que se fundamentan en la disipación máxima de la energía. [8]

²² En la fig. 6.16b se representan en color rojo a los átomos con mayor energía y en lila a los menos energéticos.

²³ Este campo puede cambiar severamente con respecto a la aceleración [80].

²⁴ En esas figuras se representan en color rojo a los átomos de mayor esfuerzo y en lila a los de menor esfuerzo.

²⁵ Estos campos también pueden cambiar severamente con respecto a la aceleración [80].

²⁶ Este postulado se basa en el criterio de un esfuerzo máximo [8].

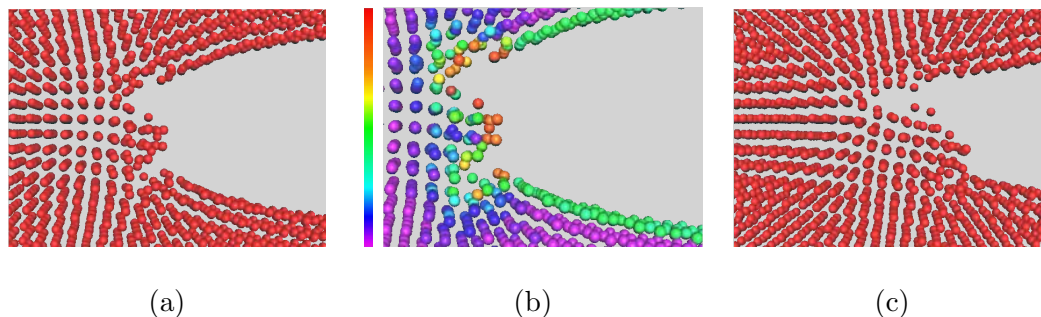


Figura 6.16: Fractura en (110) con MSW1, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 2000 –los átomos exhiben el intervalo de energía– y (c) 2500 .

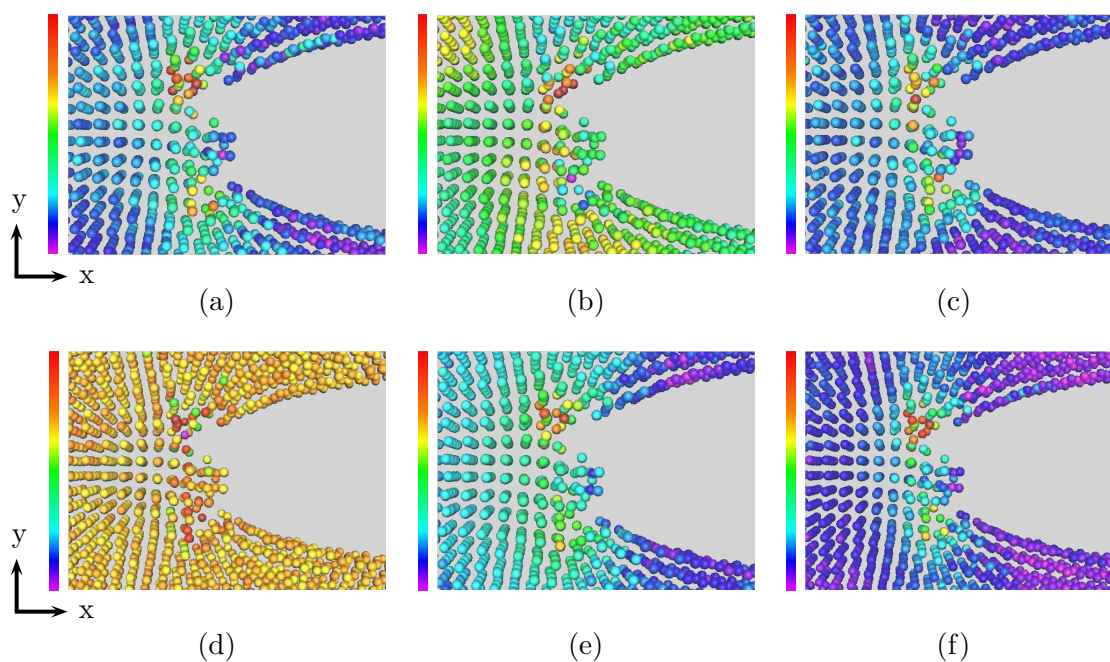


Figura 6.17: Fractura en (110) con MSW1, a los 2000 pasos de tiempo, en la que se muestra para los átomos constituyentes el intervalo de esfuerzos: (a) σ_{xx} , (b) σ_{xy} , (c) σ_{yy} , (d) σ_{yz} , (e) σ_{zz} , (f) σ_1 .

6.5. Comentarios finales

En las *pequeñas* simulaciones realizadas en esta investigación se lograron apreciar morfologías, estructuras y velocidades observadas o mencionadas en otras *grandes* simulaciones (capítulo 2), en experimentos (capítulo 2) y en la teoría del conti-

nuo²⁷ (capítulo 2); sin embargo, en ciertos casos también existieron discrepancias²⁸ –en la tabla 6.3 se resumen algunos de los resultados– .

Las semejanzas detectadas son notables, pues en las simulaciones se tuvieron ciertos hechos discutibles –por ejemplo: se utilizó un potencial empírico (sin cálculos de mecánica cuántica)²⁹ para derivar las fuerzas interatómicas, se implementaron en las muestras nanométricas altas tasas de deformación (0.39 Ts^{-1})³⁰ y se revelaron tiempos efímeros de propagación de la fractura ($\sim 7 \text{ ps}$)³¹– que conllevaban a que se tuvieran grandes contrastes, en las escalas de longitud y de tiempo, entre las simulaciones y los experimentos. Sucesos de este tipo han generado dudas en algunos investigadores [33, 9] de si los procesos de fractura conducidos a través de artificiales altas velocidades de deformación –como la utilizada en esta investigación– son representativos de lo que ocurre en procesos realizados en bajas velocidades de deformación.

Por lo pronto, y como ya se mencionó, con el modelo simulado en este trabajo sí se encontraron resultados semejantes a los observados a nivel macro, entre estas semejanzas destaca –por la liga con la hipótesis planteada– la percibida en la morfología de las superficies de fractura de las muestras nanométricas simuladas –casos: A, C, D, G, H³² y J– con respecto a la detectada en probetas milimétricas [8] fracturadas

²⁷ No obstante, los fundamentos del continuo [126] no son aplicables a las muestras simuladas, pues en éstas resultan vitales los comportamientos atómicos, existe anisotropía y se generan deformaciones no elásticas, las cuales contrastan con lo establecido en el continuo [33].

²⁸ Éstas se dieron, principalmente, en aspectos morfológicos; pues en algunas de las muestras simuladas a la temperatura inicial de 300 K –específicamente, en dos de los tres casos H de la tabla 5.1–, se avizoraron deflexiones en el plano primario de propagación de la grieta hacia otro(s) plano(s) (ver página 47) –en la práctica y bajo ciertas condiciones de carga, también se llegan a presentar deflexiones, aunque no hacia los planos detectados en las simulaciones; a través de las deflexiones, los sistemas buscan disipar el exceso energético [13]–. Las posibles causas que originaron las *extrañas* deflexiones detectadas, pudieran ser el mayor contenido energético inicial [21] y el efecto de amortiguamiento [12], o la interacción de estos efectos.

²⁹ Cox *et al.* [9] han argumentado que este tratamiento falla en explicar algunos fenómenos observados de fractura dinámica, por ejemplo: la anisotropía en la dirección preferida de clivaje en silicio.

³⁰ Fineberg *et al.* [8] consideran estas velocidades de deformación ($\dot{\epsilon}$) como explosivas, en la práctica se manejan tasas de $1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ [59].

³¹ Hauch *et al.* [66] y Fineberg *et al.* [66] han realizado experimentos en los que los tiempos de propagación son alrededor de los $20 \mu\text{s}$.

³² Bajo una de las tres diferentes condiciones de frontera empleadas, ver página 48.

en experimentos. Esta similitud evoca el concepto de autoafinidad [36, 45]³³.

Sin embargo, a pesar de las coincidencias encontradas entre los resultados de éstas, y otras simulaciones [8, 34, 84, 88, 71, 35], con los productos procedentes de experimentos y con los postulados de la teoría, aún se requieren de simulaciones más refinadas para lograr construir un *punte continuo* entre el conocimiento generado por estas herramientas y otros modelos recientes (por ejemplo: el modelo de red de análisis [9] (en el siguiente capítulo se mencionan posibles líneas para futuras investigaciones)).

³³ Originalmente, Mandelbrot *et al.* [48] introdujeron el concepto de *fractales* para referirse a las formas geométricas que pueden ser separadas en partes, en la que cada parte es una versión reducida del todo. Para el caso de objetos naturales como lo son las superficies de fractura se maneja el término de *fractales autoafines*, donde su caracterización fractal se auxilia en la determinación del exponente de rugosidad [60]. Sin embargo, el pequeño tamaño de las muestras simuladas hizo imposible el cálculo de éste.

Tabla 6.3: Resumen de resultados de algunos de los casos simulados.

Caso	Potencial, plano y T_{inicial}	Observaciones de la fractura
A	MSW1, (110), 100 K	En los planos de clivaje: La estructura cristalina casi no se alteró durante el proceso (salvo al inicio y en regiones focalizadas), la morfología de las superficies fue lisa, las velocidades instantáneas de las puntas de las grietas tuvieron un aumento casi lineal con respecto al tiempo y las velocidades promedio presentaron los valores más altos. En el plano de no clivaje: La estructura cristalina se perdió ligeramente en los alrededores cercanos a la fractura, la morfología de las superficies fue rugosa, la velocidad instantánea de la punta de la grieta mostró un comportamiento <i>oscilatorio</i> y la velocidad promedio tuvo el valor más bajo.
B	" , (100), "	
C	" , (111), "	
H	MSW1, (110), 300 K	Tanto en los planos de clivaje como en el de no clivaje se percibieron en las estructuras cristalinas, en las morfologías de las superficies y en las tendencias de las velocidades promedios y de las velocidades instantáneas de las puntas de las grietas, comportamientos parecidos a los detectados en las muestras correspondientes a 100 K. Sin embargo, en estas muestras se percibió que la trayectoria de la grieta estuvo fuertemente influenciada por el valor del coeficiente de fricción.
I	" , (100), "	
J	" , (111), "	
M	MSW2, (110), 100 K	Fractura embotada, con pérdida de la estructura cristalina de la muestra.
N	SW, (110), 100 K	Fracturas embotadas, con zonas de alta deformación plástica en las muestras.
O	" , (100), "	
P	" , (111), "	

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS DE TRABAJOS FUTUROS

7.1. Conclusiones

- El modelo de tensión uniaxial –en silicio–¹ simulado en el presente trabajo por dinámica molecular generó –bajo ciertas condiciones iniciales y de frontera– la propagación de la grieta con algunas características (morfología de las superficies, valores promedios de la velocidad, propagación frágil de la grieta en los planos de clivaje, influencia de los componentes tensoriales del esfuerzo en la trayectoria de la grieta) similares a las establecidas en la teoría [61, 8], a lo observado en experimentos [67, 66, 113, 7] y en otras simulaciones [34, 84, 88, 71, 81, 33, 31].
- Los potenciales SW [51] y MSW2 [49] resultaron inadecuados para simular la fractura del silicio –bajo ninguna de las condiciones utilizadas–, pues causaban ductilidad y amorfismo, respectivamente, que impedían la propagación de la grieta. Experimentalmente [18, 66] y en otras simulaciones [34, 84, 88, 71] se tiene que la fractura en silicio cristalino se propaga de manera frágil en los

¹ Incluyó componentes utilizados en diferentes trabajos [12, 49, 50, 51, 26, 52, 53, 54].

planos de clivaje, si bien, bajas ciertas condiciones de carga se presentan en las superficies de fractura arreglos definidos [18, 67, 66] y amorfismo en los alrededores de la punta de la grieta [88], estas características no detienen la propagación.

- El potencial MSW1 [50] generó características morfológicas *lisas* en las superficies fracturadas en los planos de clivaje de las muestras simuladas, estas superficies resultaron similares a las detectadas en otras simulaciones [34, 84, 88, 71] y en experimentos macroscópicos [18, 66]; precisamente, esta última semejanza evoca el concepto de autoafinidad de las superficies [36, 45].
- La morfología de las superficies de fractura simuladas resultó ser una función del plano de la fractura –cuando las otras condiciones iniciales y de frontera se mantuvieron fijas–. De tal manera que en las muestras, con temperatura inicial de 100 K, se generaron superficies *lisas* para los planos de clivaje (111) y (110), en tanto que para el plano de no clivaje (100) se produjeron superficies con rasgos de rugosidad; estas características fueron parecidas a las observadas en otras simulaciones [34, 81, 33, 71, 88].
- La morfología de las superficies de fractura simuladas se percibió más compleja al incrementarse la temperatura inicial de las muestras, de 100 K a 300 K, tanto en el plano de clivaje (110) como en el plano de no clivaje (100).
- La propagación de la grieta en el plano (111) de las muestras a 100 K iniciales no exhibió, en general, un cambio significativo en la trayectoria al modificar el valor del coeficiente de amortiguamiento; sin embargo, en el plano (110) de las muestras a 300 K iniciales sí se detectaron cambios en la trayectoria al variar el coeficiente.
- Las velocidades promedio de propagación de las grietas simuladas resultaron mayores en los planos de clivaje, lo que concuerda cualitativamente con lo

percibido en resultados experimentales [7].

- Las velocidades instantáneas de las puntas de las grietas simuladas mostraron comportamientos inestables, así en el plano de clivaje (111) y en el de no clivaje (100) se tuvieron dos regímenes fundamentales: una aceleración rápida y uniforme, y una aceleración y desaceleración oscilante, respectivamente. En el primer escenario se observó que al propagarse la grieta dejaba tras de sí una superficie lisa, y en el segundo se generaba una superficie rugosa.
- Los máximos valores del tensor de esfuerzos *atómicos* en las muestras simuladas resultaron útiles para sugerir el camino de propagación de la grieta.

7.2. Perspectivas de trabajos futuros

La simulación por dinámica molecular es una herramienta de análisis indispensable hoy en día en la ciencia de materiales. Su aplicación permite obtener nuevo conocimiento que complementa el obtenido en teorías y en experimentos. A continuación se presentan algunas recomendaciones para continuar con esta línea de investigación, principalmente, en la fractura:

- Perfeccionar la implementación –y el análisis– del amortiguamiento, y desarrollar o manejar nuevas condiciones frontera que muestren aún mayores similitudes entre los resultados del modelo y los experimentos.
- Afinar el intervalo de tiempo de recopilación de datos (en el presente trabajo se manejaron 500 pasos de tiempo) para obtener más detalles de la propagación².

A la par, cuantificar más características de las muestras, por ejemplo: tempe-

² Sharon *et al.* [3] mostraron la importancia de este punto en la propagación dinámica, pues en un estudio experimental en el que manejaron 2 diferentes resoluciones espaciales, observaron que en las mediciones de alta resolución se detectaban comportamientos –por ejemplo: oscilaciones de gran amplitud en la velocidad instantánea– que pasaban desapercibidos en las mediciones de baja resolución. .

raturas y números de coordinación atómica, principalmente, en los alrededores de la punta de la grieta.

- Modificar el código para hacerlo más eficiente, con esto se pretende reducir el tiempo de ejecución de las simulaciones de la fractura; simultáneamente, simular en equipo de cómputo más potente.
- Adecuar el modelo de tensión uniaxial para registrar $v(G)$, tal y como se realiza en algunos experimentos [8] y simulaciones [8].
- Desarrollar y/o manejar potenciales o metodologías cuánticas o semicuánticas más confiables [81, 10, 35] para modelar el material *–silicio–* sometido a fractura.
- Equiparar las escalas de observación entre los experimentos de fractura y las simulaciones, para esto se tendrían que incrementar las dimensiones de las muestras en las simulaciones, tal vez a través de un método de múltiples escalas que ligue dinámicamente [55, 127] la mecánica del continuo *–elementos finitos–* con la dinámica molecular de potenciales empíricos y la dinámica cuántica de enlace fuerte (TB).³ A la par, habría que ensayar silicio a tensión en escala nanométrica, Umesh Bhaskar *et al.* [128] recién han establecido una técnica para pruebas de este tipo. Con esto, se podrían comparar los resultados entre los experimentos y las simulaciones *–en estas últimas se pretendería observar la interacción entre los átomos en la punta y el efecto macroscópico que ellos generan (Fineberg en [118])–*, y además, se lograría la caracterización cuantitativa autoafín de las superficies de fractura simuladas.

³ Aunque existen versiones como las de Ravi-Chandar [7] que menciona que no es apropiado ligar directamente las simulaciones MD con modelos de macro escala a través de métodos de elementos finitos, cuando el objetivo es escalar los resultados de la MD, pues se ignora la estructura meso escala y su influencia; y que si bien, este tratamiento puede ser aceptable en determinar propiedades globales independientes de la estructura, probablemente, no lo es para analizar fenómenos dependientes de la escala y de la estructura, como lo es la fractura.

- Extender la aplicación de las simulaciones de dinámica molecular a otros ámbitos de la fractura (ensayo de materiales cristalinos con defectos o de materiales amorfos, transición frágil-cuasi frágil, fatiga, compresión, entre otros) y de la ciencia de materiales (difusión, cambios de fases, interfases dinámicas amorfas-cristales, nanopartículas *core-shell*, etcétera).

APÉNDICE A

Potenciales empíricos SW, MSW1 y MSW2

La función de energía potencial Φ del potencial SW presenta la siguiente forma:

$$\Phi(1, \dots, N) = \sum_{\substack{i,j \\ i < j}} v_2(i, j) + \sum_{\substack{i,j,k \\ i < j < k}} v_3(i, j, k) \quad (\text{A.1})$$

La interacción v_2 del potencial entre pares de átomos tiene la sucesiva configuración:

$$v_2(r_{ij}) = \varepsilon f_2(r_{ij}/\sigma), \quad (\text{A.2})$$

$$f_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-a}) \exp[\delta/(r - b)], & r < b \\ 0, & r \geq b \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

donde $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

La interacción v_3 del potencial que involucra tres átomos presenta la subsecuente estructura:

$$v_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = \sum f_3(r_i/\sigma, r_j/\sigma, r_k/\sigma), \quad (\text{A.4})$$

$$f_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}), \quad (\text{A.5})$$

donde

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda \exp \left[\gamma (r_{ij} - b)^{-1} + \gamma (r_{ik} - b)^{-1} \right] \left[\cos \theta_{jik} + \frac{1}{3} \right]^2, \quad \lambda > 0 \quad (\text{A.6})$$

θ_{jik} es el ángulo subtendido por r_j y r_k con vértice en i .

Los valores de los parámetros de este potencial se dan en la tabla A.1.

Los potenciales MSW1 y MSW2 presentan la misma forma que el potencial original SW, salvo algunas diferencias en los valores de los parámetros, estos se dan en la tabla A.1.

Tabla A.1: Valores de los parámetros de los potenciales SW, MSW1, MSW2.

	SW	MSW1	MSW2
A	7.049556277	7.049556277	6.865464121
B	0.602224558	0.602224558	0.611445848
ε (eV)	2.17	2.17	2.17
σ (\AA)	2.0951	2.0951	2.0951
λ	21.0	42.0	9.11
δ	1.0	1.0	0.9757
p	4	4	4
q	0	0	0
γ	1.2	1.2	1.2
b	1.8	1.8	1.8

BIBLIOGRAFÍA

- [1] K. B. Broberg. *Cracks and Fracture*. Academic Press, San Diego, 1999.
- [2] T. L. Anderson. *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications, Third Edition*. CRC Press, Taylor & Francis Group, 2005.
- [3] E. Sharon and J. Fineberg. The dynamics of fast fracture. *Advanced Engineering Materials*, 1(2):119–122, 1999.
- [4] L. B. Freund. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge, University Press, Cambridge, UK, second edition, 1998.
- [5] E. E. Gdoutos. *Fracture Mechanics An Introduction*, volume 123 of *Solid Mechanics and its Applications*. Springer, P.O. Box 17, 3300 AA Dordrecht, The Netherlands., second edition, 2005.
- [6] A. A. Griffith. The phenomenon of rupture and flow in solids. *Philos. Trans. R. Soc. London*, A221:163–198, 1920.
- [7] K. Ravi-Chandar. *Dynamic Fracture*. Elsevier Ltd, The Boulevard, Langford Lane, Kidlington, Oxford OX5 1GB, UK, 2004.
- [8] J. Fineberg and M. Marder. Instability in dynamic fracture. *Physics Reports*, 313:1–108, 1999.
- [9] B. N. Cox, H. Gao, D. Gross, and D. Rittel. Modern topics and challenges in dynamic fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, 53:565–596, 2005.
- [10] Markus J. Buehler, Farid F. Abraham, and Huajian Gao. Hyperelasticity governs dynamic fracture at a critical length scale. *Nature*, 426:141–146, 2003.
- [11] K. Ravi-Chandar. Dynamic fracture of nominally brittle materials. *International Journal of Fracture*, 90(83–102), 1998.
- [12] P. Gumbsch, S. J. Zhou, and B. L. Holian. Molecular dynamics investigation of dynamic crack stability. *Phys. Rev. B*, 55(6):3445–3455, 1997.
- [13] J. Fineberg, S. P. Gross, M. Marder, and H. L. Swinney. Instability in dynamic fracture. *Phys. Rev. Lett.*, 67(457), 1991.
- [14] M. Marder and Xiangming Liu. Instability in lattice fracture. *Phys. Rev. Lett.*, 71(15):2417–2420, 1993.
- [15] Farid F. Abraham, D. Brodbeck, R. A. Rafey, and W. E. Rudge. Instability dynamics of fracture: A computer simulation investigation. *Phys. Rev. Lett.*, 73(2):272–275, 1994.

- [16] F. F. Abraham, D. Brodbeck, W. E. Rudge, and X. Xu. A molecular dynamics investigation of rapid fracture mechanics. *J. Mech. Phys. Solids*, 45(9):1595–1619, 1997.
- [17] Farid F. Abraham. Instability dynamics in three-dimensional fracture: An atomistic simulation. *J. Mech. Phys. Solids*, 45(9):1461–1471, 1997.
- [18] T. Cramer, A. Wanner, and P. Gumbsch. Crack velocities during dynamic fracture of glass and single crystalline silicon. *Phys. Status Solidi (a)*, 164:R5–R6, 1997.
- [19] F. F. Abraham. The atomic dynamics of fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49:2095–2111, 2001.
- [20] F. Abraham. Unstable crack motion is predictable. In D. P. Landau, S. P. Lewis, and H. B. Schüttler, editors, *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVIII*, volume 105, pages 39–45. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [21] D. Sherman. Aspects of rapid crack propagation in silicon. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 30:32–40, 2006.
- [22] William T. Ashurst and William G. Hoover. Microscopic fracture studies in the two-dimensional triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 14(4):1465–1473, 1976.
- [23] Brad Lee Holian, Peter S. Lomdahl, and Shujia Zhou. Fracture simulations via large-scale nonequilibrium molecular dynamics. Technical Report LA-UR-96-2484, Los Alamos National Laboratory, 1996.
- [24] M. J. Buehler. *Dynamic Fracture Mechanics*, chapter 1 Modeling Dynamic Fracture Using Large-Scale Atomistic Simulations. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2006.
- [25] Farid F. Abraham. Computational statistical mechanics methodology, applications and supercomputing. *Adv. Phys.*, 35(1):1–111, 1986.
- [26] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1987.
- [27] Wm. G. Hoover. *Computational Statistical Mechanics*. Elsevier, Amsterdam, 1991.
- [28] J. M. Haile. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*. Wiley, 1992.
- [29] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 1995.
- [30] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications*. Academic Press, 2002.

- [31] S. J. Zhou, P. S. Lomdahl, R. Thomson, and B. L. Holian. Dynamic crack processes via molecular dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 76(13):2318–2321, 1996.
- [32] S. J. Zhou, D. M. Beazley, P. S. Lomdahl, and B. L. Holian. Large-scale molecular dynamics simulations of three-dimensional ductile fracture. *Phys. Rev. Lett.*, 78(3):479–482, 1997.
- [33] Dominic Holland and Michael Marder. Cracks and atoms. *Adv. Mater.*, 11(10):793–806, 1999.
- [34] Rubén Pérez and Peter Gumbsch. Directional anisotropy in the cleavage fracture of silicon. *Phys. Rev. Lett.*, 84(23):5347–5350, 2000.
- [35] M. J. Buehler, H. Tang, A. C. T. van Duin, and W. A. Goddard III. Threshold crack speed controls dynamical fracture of silicon single crystals. *Phys. Review Letters*, 99:165502–1–165502–4, 2007.
- [36] Jorge Adrián Aldaco Castañeda. Autoafinidad de superficies de fractura en una aleación de aluminio-silicio. Master’s thesis, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad Autónoma de Nuevo León, 2000.
- [37] M. Hinojosa, J. Aldaco, U. Ortiz, and V. González. Roughness exponent of the fracture surface of an al-si alloy. *Aluminum Trans.*, 3(1):53–57, 2000.
- [38] M. Hinojosa and J. Aldaco. Self-affine fracture surface parameters and their relationship with microstructure in a cast aluminum alloy. *J. Mater. Res.*, 17:1276–1282, 2002.
- [39] V. A. González, O. Chacón, M. Hinojosa, and C. Guerrero. Statistical assessment of self-affine applied to short profiles. *Fractals*, 10(3):373–286, 2002.
- [40] M. Hinojosa, V. González, J. Sánchez, and U. Ortiz. Scaling properties of the fracture surfaces of a crystalline polymer. *Polymer*, 45:4829–4836, 2004.
- [41] M. Hinojosa, J. Aldaco, R. Rodriguez, and U. Ortiz. Roughness exponents, microstructure, correlation length, and the possible origin of self-affine. In *Fracture*, volume 882E, pages EE3.1.1–EE3.1.6. Mater. Res, Soc. Symp. Proc., 2005.
- [42] F. J. Garza-Méndez, M. Hinojosa-Rivera, I. Gómez, and E. Sánchez. Scaling properties of fracture surfaces on glass strengthened by ionic exchange. *Applied Surface Science*, 527:6474–6477, 2007.
- [43] M. Hinojosa, E. Reyes-Melo, C. Guerra, V. González, and U. Ortiz. Scaling properties of slow fracture in glass: from deterministic to irregular topography. *Int. J. Fract.*, 2008. DOI 10.1007/s10704-008-9251-1.
- [44] L. Chávez-Guerrero, F.J. Garza, and M. Hinojosa. Scaling exponents for fracture surfaces in opal glass. *Materials Science and Engineering A*, 527:6474–6477, 2010.

- [45] E. Bouchaud. Scaling properties of cracks. *J. Phys. Condens. Matter*, 9(21):4319–4344, 1997.
- [46] M. Ippolito, A. Mattoni, L. Colombo, and N. Pugno. Role of lattice discreteness on brittle fracture: Atomistic simulations versus analytical models. *Phys. Rev. B*, 73(10):104111–1–104111–6, 2006.
- [47] Robert W. Cahn. The coming of materials science. In *Pergamon Materials Series*, volume 5. Elsevier Science Ltd., 2001.
- [48] B. B. Mandelbrot, D. E. Passoja, and A. J. Paullay. Fractal character of fracture surfaces of metals. *Nature*, 308(721), 1984.
- [49] Zi Jian, Zhang Kaiming, and Xie Xide. Modification of Stillinger-Weber potentials for Si and Ge. *Phys. Rev. B*, 41(18):12915–12918, 1990.
- [50] Dominic Holland and M. Marder. Erratum: Ideal brittle fracture of silicon studied with molecular dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 81(18):4029, 1998.
- [51] F. H. Stillinger and T. A. Weber. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, 31(8):5262–5271, 1985.
- [52] Jerry Z. Yang and Xiantao Li. Comparative study of boundary conditions for molecular dynamics simulations of solids at low temperature. *Phys. Rev. B*, 73(224111):1–10, 2006.
- [53] Brad Lee Holian and Ramon Ravelo. Fracture simulations using large-scale molecular dynamics. *Phys. Rev. B*, 51(17):11275–11288, 1995.
- [54] Luciano Colombo. A source code for tight-binding molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*, 12(3):278–287, 1998.
- [55] F. F. Abraham, N. Bernstein, J. Q. Broughton, and D. Hess. Dynamic fracture of silicon: Concurrent simulation of quantum electrons, classical atoms, and the continuum solid. *MRS Bull.*, 25:27–32, May 2000.
- [56] M. Marder. Molecular dynamics of cracks. *Computing in Science & Engineering*, 1(5):48–55, 1999.
- [57] M. Marder. Effects of atoms on brittle fracture. *International Journal of Fracture*, 130(517–555), 2004.
- [58] L. B. Freund. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge, University Press, Cambridge, UK, 1990.
- [59] George Ellwood Dieter. *Mechanical Metallurgy*. McGraw-Hill, third edition, 1986.
- [60] Daniel Bonamy. Intermittency and roughening in the failure of brittle heterogeneous materials. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42(21):214014, 2009.

- [61] R. V. Goldstein and R. Salganik. Brittle fracture of solids with arbitrary cracks. *International Journal of Fracture*, 10(507–523), 1974.
- [62] M. Marder. Cracks cleave crystals. *Europhysics Letters*, 66(3):364, 2004.
- [63] A. Stroh. A theory of the fracture of metals. *Philos. Mag.*, 6:418–465, 1957. Supplement: Advances in Physics.
- [64] E. Sharon and J. Fineberg. Confirming the continuum theory of dynamic brittle fracture for fast cracks. *Nature*, 397:333–335, 1999.
- [65] Kin S. Cheung and Sidney Yip. Brittle-ductile transition in intrinsic fracture behavior of crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 65(22):2804–2807, 1990.
- [66] J. A. Hauch, D. Holland, M. P. Marder, and H. L. Swinney. Dynamic fracture in single crystal silicon. *Phys. Rev. Lett.*, 82:3823, 1999.
- [67] T. Cramer, A. Wanner, and P. Gumbsch. Energy dissipation and path instabilities in dynamic fracture of silicon single crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 85(4):788, 2000.
- [68] M. Marder and S. Gross. Origin of crack tip instabilities. *J. Mech. Phys. Solids*, 43(1):1–48, 1995.
- [69] J. C. H. Spence, Y. M. Huang, and O. Sankey. Lattice trapping and surface reconstruction for silicon cleavage on (111). ab-initio quantum molecular dynamics calculations. *Acta Metallurgica et Materialia*, 41(10):2815–2824, 1993.
- [70] J. A. Hauch and M. P. Marder. Energy balance in dynamic fracture, investigated by a potential drop technique. *Int. J. Fract.*, 90:133–151, 1998.
- [71] N. Bernstein and D. W. Hess. Lattice trapping barriers to brittle fracture. *Phys. Rev. Lett.*, 91(2):025501–1–025501–4, 2003.
- [72] T. Cramer, A. Wanner, and P. Gumbsch. Dynamic fracture of glass and single crystalline silicon. *Z. Metallkd.*, 90:675–686, 1999.
- [73] Ilan Beery, Uri Lev, and Dov Sherman. On the lower limiting velocity of a dynamic crack in brittle solids. *Journal of Applied Physics*, 93(5):2429–2434, 2003.
- [74] E. Sarris and P. Papanastasiou. The influence of the cohesive process zone in hydraulic fracturing modelling. *Int. J. Fract.*, 167:33–45, 2011.
- [75] L.I. Slepyan and A.L. Fishkov. The problem of the propagation of a cut at transonic velocity. *Soviet Phys. Dokl.*, 26:1192–1193, 1981.
- [76] L.I. Slepyan. *Models and Phenomena in Fracture Mechanics*. Springer, New York, 2002.

- [77] R. Thompson. Lattice trapping of fracture cracks. *J. Appl. Phys.*, 42:3154–3160, 1971.
- [78] J. W. Dally. Dynamic photoelastic studies of fracture. *Exp. Mech.*, 19:349–361, 1979.
- [79] Farid F. Abraham. Dynamics of brittle fracture with variable elasticity. *Phys. Rev. Lett.*, 77(5):869–872, 1996.
- [80] M. J. Buehler, F. F. Abraham, and H. Gao. Stress and energy flow field near a rapidly propagating mode I crack. In *Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, page 143. Springer, New York, 2004.
- [81] Dominic Holland and M. Marder. Ideal brittle fracture of silicon studied with molecular dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 80(4):746–749, 1998.
- [82] J. S. Lin, A. Qteish, M. C. Payne, and V. Heine. Optimized and transferable nonlocal separable ab initio pseudopotentials. *Phys. Rev. B*, 47(8):4174–4180, 1993.
- [83] A. George and G. Michot. Dislocation loops at crack tips: nucleation and growth— an experimental study in silicon. *Mater. Sci. and Eng. A*, 164(1–2):118–134, 1993.
- [84] N. Bernstein and D. Hess. Multiscale simulations of brittle fracture and the quantum-mechanical nature of bonding in silicon. In L. P. Kubin, R. L. Selinger, J. L. Bassani, and K. Cho, editors, *Multiscale Modeling of Materials –2000*, volume 653, pages Z2.7.1–Z2.7.6. Materials Research Society, Warrendale, MRS Symposia Proceedings, 2001.
- [85] M. Z. Bazant, E. Kaxiras, and J. F. Justo. Environment-dependent interatomic potential for bulk silicon. *Phys. Rev. B*, 56:8542–8552, 1997.
- [86] N. Bernstein and E. Kaxiras. Nonorthogonal tight-binding hamiltonians for defects and interfaces in silicon. *Phys. Rev. B*, 56:10488–10496, 1997.
- [87] J. F. Justo, M. Z. Bazant, E. Kaxiras, V. V. Bulatov, and S. Yip. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases. *Phys. Rev. B*, 58:2539–2550, 1998.
- [88] J. G. Swadener, M. I. Baskes, and M. Nastasi. Molecular dynamics simulation of brittle fracture in silicon. *Phys. Rev. Lett.*, 89(8):085503–1–085503–4, 2002.
- [89] S. Nose. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J. Chem. Phys.*, 81(1):511–519, 1984.
- [90] M. I. Baskes. Application of the embedded-atom method to covalent materials: A semiempirical potential for silicon. *Phys. Rev. Lett.*, 59:2666–2669, 1987.

- [91] M. J. Buehler, A. C. T. van Duin, and W. A. Goddard. Multiparadigm modeling of dynamical crack propagation in silicon using a reactive force field. *Phys. Rev. Lett.*, 96:095505, 2006.
- [92] J. Tersoff. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Phys. Rev. B*, 38(14):9902–9905, 1988.
- [93] W. G. Hoover and W. T. Ashurst. Nonequilibrium molecular dynamics. In *Theoretical chemistry: Advances and perspectives*, volume 1, pages 1–51. Academic Press, New York, 1975.
- [94] D. J. Evans and G. P. Morriss. Non-newtonian molecular dynamics. *Comput. Phys. Rep.*, 1:297–344, 1984.
- [95] Noam Bernstein. *Atomic scale structure and dynamics of amorphous-crystal interfaces in silicon: simulations with empirical and quantum -mechanical approaches*. PhD thesis, Harvard University, Cambridge, Massachusetts, 1998.
- [96] R. P. Feynman. Forces in molecules. *Phys. Rev.*, 56:340–343, 1930.
- [97] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics*, 64(4), 1992.
- [98] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136(3B):B864–B871, 1964.
- [99] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140(4A):A1133–A1138, 1965.
- [100] J. Hafner. Atomic-scale computational materials science. *Acta Materialia*, 48:71–92, 2000.
- [101] Giorgio Servalli. Simulazione quantistica di semiconduttori covalenti: Silicio liquido ed amorfo, 1992. Università degli Studi di Milano, Tesis de Licenciatura.
- [102] J. C. Slater and G. F. Koster. Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, 94:1498, 1954.
- [103] Benito de Celis. *Molecular Dynamics Simulation Studies in Fracture Mechanics*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1982.
- [104] Jonathan Andrew Zimmerman. *Continuum And Atomistic Modeling Of Dislocation Nucleation At Crystal Surface Ledges*. PhD thesis, Stanford University, 1999.
- [105] Kin S. Cheung and Sidney Yip. Atomic-level stress in an inhomogeneous system. *J. Appl. Phys.*, 70(10):5688–5690, 1991.

- [106] V. Vitek and T. Egami. Atomic level stresses in solids and liquids. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 144:145–156, 1987.
- [107] P. Babinec. Possible fractal structure of exact universal exchange-correlation potential. *ArXiv Condensed Matter e-prints*, jan 2004. Provided by the SAO/NASA Astrophysics Data System.
- [108] R.K. Kalia, A. Nakano, A. Omeltchenko, K. Tsuruta, and P. Vashista. Role of ultrafine microstructures in dynamic fracture in nanophase silicon nitride. *Physical Review Letters*, 78(11):2144–2147, 1997.
- [109] A. Nakano, R. K. Kalia, and P. Vashista. Dynamics and morphology of brittle cracks: A molecular-dynamics study of silicon nitride. *Physical Review Letters*, 75(17):3138–3141, 1995.
- [110] A. Nakano, R. K. Kalia, and P. Vashishta. Growth of pore interfaces and roughness of fracture surfaces in porous silica: Million particle molecular-dynamics simulations. *Physical Review Letters*, 73(17):2336–2339, 1994.
- [111] J. Q. Broughton, F. F. Abraham, N. Bernstein, and E. Kaxiras. Concurrent coupling of length scales: Methodolgy and application. *Phys. Rev. B*, 60(4):2391–2403, 1999.
- [112] H. Balamane, T. Halicioglu, and W. A. Tiller. Comparative study of silicon empirical interatomic potentials. *Phys. Rev. B*, 46(4):2250–2279, 1992.
- [113] B. Lawn. *Fracture in Brittle Solids*. Cambridge University Press, 2nd. edition, 1993.
- [114] C. P. Chen and M. H. Leipold. Fracture toughness of silicon. *Am. Ceram. Soc. Bull.*, 59:469–472, 1980.
- [115] Charles Kittel. *Introducción a la física del estado sólido*. Editorial Reverté, S. A., 1995.
- [116] M. A. Meyers and K. K. Chawla. *Mechanical Metallurgy principles and applications*. Prentice Hall, 1984.
- [117] M. P. Hodges. *XMakemol: A program for visualizing atomic and molecular, version 5*, 2001.
- [118] Jay Fineberg. Close-up on cracks. *Nature*, 426:131–132, 2003.
- [119] Nagarajan Sounderya and Yong Zhang. Use of core/shell structured nanoparticles for biomedical applications. *Recent Patents on Biomedical Engineering*, 1:34–42, 2008.
- [120] Abu Md. Asaduzzaman and Michael Springborg. Structural and electronic properties of Si/Ge nanoparticles. *Physical Review B*, 74(165406):1–7, 2006.

- [121] ASM International. Handbook Committee. *Fractography*, volume 12 of *ASM Handbook*. ASM International, 1987.
- [122] Jay Fineberg, Steven P. Gross, M. Marder, and Harry L. Swinney. Instability in the propagation of fast cracks. *Physical Review B*, 45(10):5146–5154, 1992.
- [123] Onuttom Narayan and Daniel S. Fisher. Threshold critical dynamics of driven interfaces in random media. *Physical Review B*, 48(10):7030–7042, 1993.
- [124] Sharad Ramanathan and Daniel S. Fisher. Onset of propagation of planar cracks in heterogeneous media. *Physical Review B*, 58(10), 1998.
- [125] K. Takahashi, K. Matsushige, and Y. Sakurada. Precise evaluation of fast fracture velocities in acrylic polymers at the slow-to-fast transition. *Journal of Materials Science*, 19:4026–4034, 1984. 10.1007/BF00980767.
- [126] Enzo Levi. *Elementos de mecánica del medio continuo*. Limusa, 1971.
- [127] M. Ortiz, A. M. Cuitiño, J. Knap, and M. Koslowski. Mixed atomistic-continuum models of material behavior: The art of transcending atomistics and informing continua. *MRS Bulletin*, pages 216–221, 2001.
- [128] Umesh Bhaskar, Vikram Passi, Azeem Zulfiqar, Ulf Södervall, Bengt Nilsson, Goran Petersson, Mats Hagberg, Thomas Pardoen, and Jean Pierre Raskin. On-chip tensile testing of the mechanical and electro-mechanical properties of nano-scale silicon free-standing beams. *Advanced Materials Research*, 276:117–126, 2011.

LISTA DE FIGURAS

6.1. Fractura embotada: (a) con MSW2, en (100), a los 1000 pasos de tiempo y (b) con SW, en (110), a los 2500 pasos de tiempo.	40
6.2. Fractura en el plano (110) simulada con MSW1 y 100 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 2500 y (c) 4000	41
6.3. Fractura en el plano (100) simulada con MSW1 y 100 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 2500 y (c) 3000	42
6.4. Fractura en el plano (111) simulada con MSW1 y 100 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2500 y (c) 3500	42
6.5. Fractura en el plano (110) simulada con MSW1 y 300 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 4500 y (c) 4500	44
6.6. Fractura en el plano (100) simulada con MSW1 y 300 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 2500, (b) 3000 y (c) 5000	44
6.7. Fractura en el plano (111) simulada con MSW1 y 300 K iniciales, observada en 3 diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2500 y (c) 3500	45
6.8. Fractura en el plano (111) simulada con MSW1, 100 K iniciales y $\zeta=0.002$, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2000 y (b) 3500	46

6.9. Fractura en el plano (111) simulada con MSW1, $\zeta=0.0002$ y 100 K iniciales, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2500 y (b) 3000	46
6.10. Fractura en el plano (111) simulada con MSW1, $\zeta=0$ y 100 K iniciales, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2000 y (b) 3500	47
6.11. Fractura en el plano (110) simulada con MSW1, a 300 K iniciales y diferentes ζ , observada en distintos pasos de tiempo (pt): (a) $\zeta = 0.002$ (6000 pt), (b) $\zeta = 0.0002$ (5500 pt) y (c) $\zeta = 0$ (4500 pt).	48
6.12. Velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano: (a) (111) y (b) (110), en muestras a 100 K iniciales.	50
6.13. Velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano: (a) (111) y (b) (110), en muestras a 300 K iniciales.	51
6.14. Velocidad instantánea de la punta de la grieta en el plano: (100), en muestras a 100 K iniciales.	52
6.15. Evolución de la punta de la grieta en el plano (100) –caso B–, en diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2000, (c) 2500, (d) 3000, (e) 4000 y (f) 5000	53
6.16. Fractura en (110) con MSW1, en diferentes pasos de tiempo: (a) 2000, (b) 2000 –los átomos exhiben el intervalo de energía– y (c) 2500 . . .	55
6.17. Fractura en (110) con MSW1, a los 2000 pasos de tiempo, en la que se muestra para los átomos constituyentes el intervalo de esfuerzos: (a) σ_{xx} , (b) σ_{xy} , (c) σ_{yy} , (d) σ_{yz} , (e) σ_{zz} , (f) σ_1	55

LISTA DE TABLAS

5.1. Condiciones iniciales y en la frontera para las diversas simulaciones. . .	38
6.1. v_{prom} en los planos (111), (100) y (110), obtenida en muestras a 100 K iniciales, bajo diferentes condiciones iniciales y de frontera (Casos de la tabla 5.1: C, D, G; B, E, F; y A).	49
6.2. v_{prom} en los planos (111), (100) y (110), obtenida en muestras a 300 K iniciales, bajo diferentes condiciones iniciales y de frontera (Casos de la tabla 5.1: J, L; I, K; H* [H con el coeficiente de 0.0002], H** [H con el coeficiente de 0]).	51
6.3. Resumen de resultados de algunos de los casos simulados.	58
A.1. Valores de los parámetros de los potenciales SW, MSW1, MSW2. . .	65

RESUMEN AUTOBIOGRÁFICO

- 1976 Nace Jorge Adrián Aldaco Castañeda en Monterrey, Nuevo León, México. Padre: Sr. Aurelio Aldaco García, Madre: Sra. Martha Elena Castañeda Valenzuela.
- 1998 Título de Ingeniero Mecánico Administrador (IMA), en la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica (FIME), de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), México.
- 2000 Título de Maestría en Ciencias de la Ingeniería Mecánica con Especialidad en Materiales, en el Posgrado de la FIME, de la UANL.
- 2000 Premio de Mejor Tesis de Maestría en el área de ciencias exactas de la UANL.
- 2000–2003 Estudios de Doctorado en Ingeniería de Materiales en la FIME, UANL.
- 2000–a la fecha Profesor de la FIME, de la UANL.
- 2005–2007 Jefe de la carrera de IMA de la FIME, de la UANL.