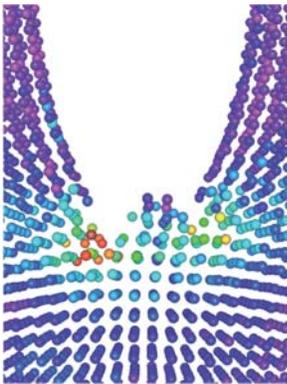


# La Dinámica Molecular como herramienta para el análisis de la física de la fractura frágil

Jorge A. Aldaco Castañeda, Moisés Hinojosa Rivera  
FIME, UANL  
jaldaco@gama.fime.uanl.mx, hinojosa@gama.fime.uanl.mx



## RESUMEN

*Se discuten algunos elementos del origen y estado del arte del uso de la Dinámica Molecular (DM) como herramienta para el estudio de la física de la fractura a nivel atómico. La DM permite elaborar modelos computacionales para analizar el proceso de propagación de grietas a escalas difícilmente accesibles mediante la experimentación convencional, lo que posibilita obtener datos numéricos referentes a la evolución de una fractura frágil o dúctil, con la finalidad de cotejar lo establecido en modelos teóricos con lo detectado en experimentos, o también para especular sobre bases científicas firmes acerca de comportamientos aún no revelados en experimentos.*

## PALABRAS CLAVE

Dinámica molecular, física de la fractura, propagación de grietas, fractura frágil.

## ABSTRACT

*We discuss some elements about the origin and the state of the art on the use of Molecular Dynamics as a tool for the study of the atomistic physics of fracture. Using Molecular Dynamics it is possible to elaborate computer models to analyze the process of crack propagation at scales that are not necessarily accessible in conventional experiments, this allows to obtain numerical data about the evolution of both brittle and ductile fracture, with the aim of comparing with what is established on theoretical models and experimental results, it is also possible to speculate, on sound scientific grounds, about behaviors not yet revealed in experiments.*

## KEYWORDS

Molecular dynamics, physics of fracture, crack propagation, brittle fracture.

## INTRODUCCIÓN

Está claro que el fenómeno de la fractura es complejo, no lineal y multiescalar y tiene su origen a nivel atómico y subatómico. El estudio de la física de la fractura debe por lo tanto considerar los fenómenos que ocurren a nivel atómico, empleando herramientas propias como la Dinámica Molecular, en lugar de usar adaptaciones de modelos para escalas macroscópicas.

Los modelos clásicos existentes tienen limitaciones evidentes. A nivel dinámico, por ejemplo, se predicen velocidades de propagación de grietas que en la práctica no se manifiestan. A nivel morfológico, en general los modelos en escalas macro y mesoscópicas fracasan en su intento de reproducir los patrones y morfologías que se registran en los estudios fractográficos. Aún las trayectorias de las grietas en medios bidimensionales, con sus características de autoafinidad, no se pueden reproducir usando métodos convencionales.

En este trabajo de divulgación nos proponemos discutir algunos de los aspectos que configuran el estado del arte en este importante y fascinante tema y se abordan a manera de ejemplo el análisis por Dinámica Molecular (DM) del fenómeno de la fractura frágil.

## ORÍGENES DE LA DINAMICA MOLECULAR

En las décadas de los 1950 y 1960, con el advenimiento de las computadoras electrónicas se abrió la posibilidad de realizar cálculos complejos en tiempos razonables y por lo tanto se pudo evitar el tener que simplificar los modelos existentes.<sup>1,2</sup> Comenzaron a multiplicarse las áreas de aplicación de las simulaciones computacionales, aunque en el campo de los materiales éstas fueron vistas con ciertos prejuicios por parte de algunos físicos. Sin embargo, esas reticencias iniciales fueron cediendo con base en los resultados obtenidos, tanto así que hace algunos pocos años Galison<sup>1</sup> estableció que “Sin simulaciones basadas en cómputo, la cultura de la microfísica de los materiales en la parte final del siglo XX no sería solamente inconveniente – ésta no existiría”.<sup>3</sup>

Enfocados en el área de la física de los materiales, se tiene que los algoritmos computacionales pueden agruparse en al menos cinco categorías:<sup>1,4</sup> Aproximaciones Monte Carlo,<sup>2</sup> Dinámica Molecular (o atómica),<sup>2</sup> Aproximaciones Variacionales,<sup>4</sup> Cálculo de Desarrollo de Parámetros (Pattern development calculation)<sup>4</sup> y Elementos Finitos.<sup>5</sup>

El término Dinámica Molecular (DM) se utiliza para describir la solución de las ecuaciones clásicas de movimiento (ecuaciones de Newton) para un conjunto de moléculas (o de átomos). Ésta se utiliza tanto para analizar sistemas en equilibrio (potenciales o fuerzas impulsoras balanceadas dentro del sistema)<sup>6</sup> como

para aquellos fuera de equilibrio (potenciales o fuerzas impulsoras desbalanceadas dentro del sistema).<sup>6</sup>

Las primeras simulaciones por Dinámica Molecular en equilibrio fueron reportadas en 1956 por Alder y Wainwright<sup>2,7</sup> en Livermore, ellos estudiaron la dinámica de un conjunto de esferas duras. El primer análisis de DM para un material “real” fue reportado en 1959 (publicada en 1960) por el grupo liderado por Vineyard y Brookhaven,<sup>2,8</sup> quienes estudiaban el daño por radiación en cobre cristalino. El primer análisis por DM de un líquido real fue reportado en 1964 por Rahman y Argonne.<sup>2,9</sup>

Los métodos de DM fuera de equilibrio aparecieron al comienzo de los 1970s<sup>10</sup> con la idea de medir coeficientes de transporte (coeficiente de difusión, conductividad térmica,...). En estos se aplica una fuerza externa al sistema para establecer la situación de no equilibrio de interés, y entonces se determina la respuesta del sistema a dicho estímulo.

## EL MÉTODO

La metodología de las simulaciones computacionales por DM se ha refinado desde entonces, aunque cabe mencionar que los algoritmos básicos apenas han cambiado desde los 1950s.<sup>2</sup> Los pasos principales en una simulación de DM son:<sup>11</sup>

- 1) Especificar el sistema de átomos o moléculas, lo cual incluye el modelo de las interacciones moleculares o atómicas, el modelo de las interacciones ambiente-sistema, y el desarrollo de ecuaciones de movimiento.
- 2) Resolver las ecuaciones de movimiento para generar las trayectorias moleculares o atómicas.
- 3) Analizar las trayectorias para obtener las propiedades de interés.

Enseguida se discuten brevemente algunos de los aspectos relacionados con esos pasos, principalmente para el análisis fuera de equilibrio:

- Las interacciones moleculares se representan a través de la energía potencial. Una aproximación muy utilizada consiste en descomponer la energía potencial en términos que involucran las interacciones de pares o tripletes de átomos. Estos potenciales comúnmente parten de una formulación empírica, tal como el potencial de Lennard-Jones<sup>12</sup> (figura 1), desarrollado para

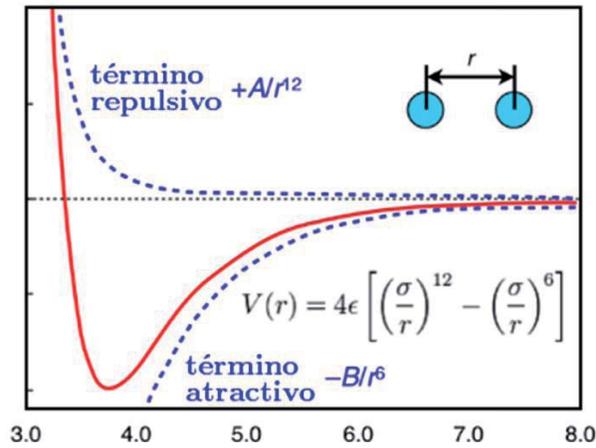


Fig. 1. El potencial de Lennard-Jones fue propuesto por John Lennard-Jones en 1924. Se utiliza para la descripción de las interacciones moleculares en un gas, que se dan como resultado de las colisiones entre las moléculas del mismo, sin que se presuma la formación de un enlace químico.<sup>13</sup>

el análisis del comportamiento a nivel atómico en gases nobles. Otros enfoques para calcular las formas de los potenciales interatómicos de diferentes tipos de átomos provienen de los llamados *primeros principios*,<sup>1</sup> donde se parte de simplificaciones de la ecuación de Schrödinger para obtener soluciones aproximadas, ya que ésta no puede resolverse de manera precisa para átomos complejos.<sup>1</sup>

- Las interacciones ambiente-sistema involucran, en parte, lo relacionado con las condiciones de frontera. La selección de estas condiciones depende de la situación física que se desea simular,<sup>11</sup> por ejemplo: Si se pretende simular un sistema perfecto infinito, se pueden utilizar condiciones de frontera periódicas (figura 2); si se quiere estudiar el comportamiento de las partículas cercanas a las paredes reales de un contenedor, se pueden usar condiciones de frontera rígidas.
- Las ecuaciones de movimiento en simulaciones fuera de equilibrio tienen la siguiente forma:<sup>10</sup>

$$\dot{q} = p / m + \mathcal{A}_p \cdot f(T) \quad (1)$$

$$\dot{p} = F - \mathcal{A}_q \cdot \mathcal{F}(t) \quad (2)$$

donde:

$\dot{q} \Rightarrow$  Derivada de las coordenadas Cartesianas de cada átomo en el sistema con respecto al tiempo.

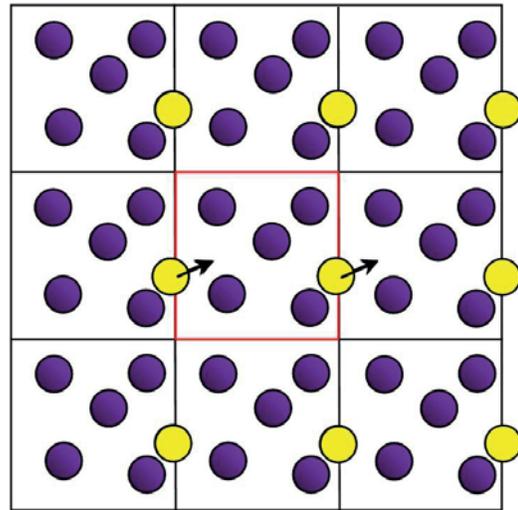


Fig. 2. Esquema de la condición frontera periódica. El volumen del sistema se representa por la celda central, el concepto de esta condición es que cuando una partícula sale del sistema por la derecha, reaparece por la izquierda. Se puede pensar en esta condición como el tener cajas de simulación idénticas rodeando el sistema.

$p \Rightarrow$  Momento atómico.

$m \Rightarrow$  Masa atómica.

$\mathcal{F}(t) \Rightarrow$  Componente vectorial  $3N$ , que representa un campo dependiente del tiempo aplicado a cada átomo y en cada una de las direcciones.  $N$  es el número de átomos o partículas.

$\mathcal{A}_p$  y  $\mathcal{A}_q \Rightarrow$  Funciones de las posiciones y de los momentos de las partículas que describen la manera en que el campo interactúa con los átomos.

$\dot{p} \Rightarrow$  Derivada del momento atómico con respecto al tiempo.

$F \Rightarrow$  Fuerza en el átomo (ésta se obtiene de la derivada de la energía potencial).

Básicamente, estas expresiones describen la dinámica de los átomos, en términos de velocidad (Ec. 1) y aceleración (Ec. 2), como respuesta a un estímulo externo y en función de las interacciones o influencias de los átomos vecinos, manifestadas por el potencial utilizado.

- Integración de las ecuaciones de movimiento: Esto se hace a través de varios algoritmos: el de Verlet,<sup>14</sup> el predictor-corrector de Gear,<sup>15</sup> y el método Leap Frog,<sup>16</sup> entre otros. De estos, de

acuerdo a Allen y Tildesley,<sup>10</sup> el más adecuado para integrar ecuaciones de movimiento en las que la velocidad aparece en el lado derecho (como usualmente sucede en las ecuaciones de movimiento fuera de equilibrio) es el predictor-corrector de Gear.<sup>15</sup> La idea básica de éste es usar la información de la posición de las partículas y sus primeras  $n$  derivadas en el tiempo  $t$  para predecir la posición y sus primeras  $n$  derivadas en el tiempo  $t + \Delta t$ . Luego, se calculan las fuerzas (éstas se obtienen de la derivada de la energía potencial), las aceleraciones y las velocidades, ecuaciones (1) y (2), utilizando las posiciones predichas. Debido a que las velocidades y aceleraciones calculadas no son iguales a las predichas, se realiza una corrección en las predicciones. Con ese ajuste se optimizan los estimados previos de las posiciones y las primeras  $n$  derivadas en el tiempo  $t + \Delta t$  (figura 3), en dicha mejora se emplean algunos coeficientes (cuyo valor depende del número de derivadas empleadas y del orden de las ecuaciones diferenciales a resolver)<sup>10</sup> que ayudan a estabilizar las trayectorias.

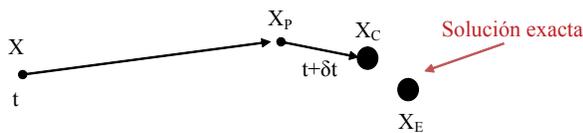


Fig. 3. Esquema que describe de manera simple el método predictor-corrector de Gear.  $X$  es la posición de la partícula en el tiempo  $t$ ,  $X_p$  es la posición predicha de la partícula en el tiempo  $t+\delta t$ ,  $X_c$  es la posición corregida de la partícula en el tiempo  $t+\delta t$ , y  $X_e$  representa la posición exacta de la partícula en el tiempo  $t+\delta t$ .

- Propiedades de interés: En función del número de átomos involucrados y de la frecuencia con que se recopilan los resultados, los algoritmos de DM proporcionan grandes cantidades de datos referentes a las posiciones atómicas y sus derivadas, y sobre las fuerzas en los átomos y sus energías potenciales. Entonces se pueden calcular: energías cinéticas, la temperatura, los esfuerzos y las deformaciones atómicas,<sup>17</sup> entre otras características (figura 4).

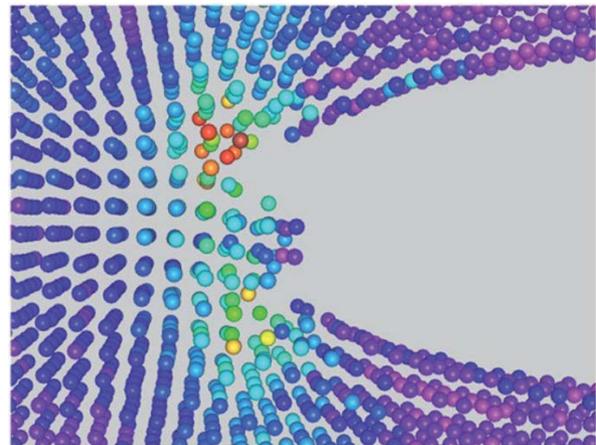


Fig. 4. Imagen que muestra las magnitudes de los esfuerzos atómicos<sup>17</sup> en una muestra simulada de silicio sometida a tensión, en ésta se presentó la propagación de una grieta. La imagen se generó a los 2000 pasos de tiempo.<sup>18</sup>

## APLICACIÓN AL FENÓMENO DE LA FRACTURA

La DM es una herramienta ideal para analizar, entre otros fenómenos, la física de la fractura de materiales, ya que en términos simples una fractura es un proceso de ruptura de enlaces interatómicos, y esto se podría “ver” y seguir mediante una simulación basada en DM (figura 4). Sin embargo, los resultados obtenidos pueden generar dudas debido a que las escalas de longitud y de tiempo que se manejan en las simulaciones son muy diferentes de las que se tiene acceso en los experimentos,<sup>19-21</sup> además, las propiedades mecánicas de los materiales en pequeñas dimensiones pueden ser muy diferentes de las que presentan los materiales macroscópicos empleados en la mayoría de las muestras experimentales, aunque tengan la misma composición.<sup>1</sup>

En la modelación y simulación por DM en general, y particularmente cuando se aplica al estudio de la fractura, el problema de la validación es particularmente delicado. Para validar simulaciones de DM se requiere la comparación de resultados de la simulación con resultados experimentales, estos últimos no siempre están disponibles y se tiene que recurrir a deducciones indirectas, sin embargo se acepta<sup>22</sup> que para la validación deben abordarse los siguientes aspectos: la calidad de la teoría o modelo empleado, la precisión del potencial usado, la

frecuencia de muestreo y el grado de convergencia logrado en la simulación, además de la calidad del software empleado y su adecuado uso.

Pero aun con dudas como las mencionadas, las simulaciones de DM fuera de equilibrio se empezaron a usar en 1976 para analizar la física de la fractura. Los pioneros fueron Ashurst & Hoover,<sup>23</sup> en sus simulaciones manejaron típicamente tiras (*strips*) periódicas de 32 átomos de altura y 512 átomos totales, que interactuaban a través de una ley de fuerza bilineal (figura 5). En sus muestras embobieron una grieta, de longitud finita, normal a la dirección de deformación tensil (esto se conoce como carga en modo I), pero como sus *strips* eran muy estrechas no pudieron evitar que las ondas de sonido se reflejaran desde las superficies libres o sujetas, o que se transmitieran a través de las fronteras periódicas; a causa de esto la fractura no presentó las características de la propagación de una grieta en una muestra infinita. Sin embargo, mucho se aprendió acerca de la fractura, tal como

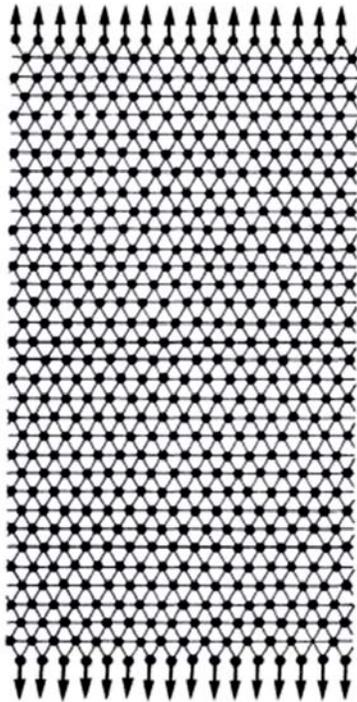


Fig. 5. Esquema que representa la red triangular de empaquetamiento compacto con 512 partículas utilizada por Ashurst & Hoover.<sup>23</sup> En las 32 partículas de las fronteras superior e inferior aplicaron una fuerza constante y en las fronteras laterales utilizaron una condición de frontera periódica.

que la grieta se aceleraba rápidamente alcanzando un valor límite en la velocidad de estado estable. Además, y en concordancia con los resultados de los experimentos, la velocidad límite resultante era mucho menor que la predicha por la teoría elástica continua (a esta última se le conoce como la velocidad de onda de Rayleigh,  $c_R$ ). Este trabajo se volvió un punto de referencia, porque por primera vez dentro de la comunidad de la fractura se discutía el origen atomístico de la propagación de la grieta, pues en anteriores discusiones dominaba el punto de vista del continuo.

De ahí en adelante, cada vez en mayor medida, empezaron a surgir investigaciones en la fractura de materiales que utilizaban análisis y simulaciones de DM. Éstas se fueron desarrollando con dos distintos enfoques:<sup>24</sup> Identificar al nivel más simple los mecanismos básicos de la fractura, o bien, determinar resultados en el nivel más alto posible de precisión para un material en particular.

Con relación al segundo enfoque se discuten enseguida los antecedentes del análisis por DM en la fractura de silicio. Cabe preguntarse ¿por qué silicio? Porque este material semiconductor<sup>25</sup> es considerado frágil,<sup>21</sup> lo que anticiparía que durante la ruptura de enlaces no se presentaría deformación plástica.

Así, entre estudios por DM realizados en este material destacan las de Holland *et al.*,<sup>26</sup> en estos emplearon un potencial interatómico Stillinger-Weber (SW)<sup>27</sup> para corroborar los postulados de un modelo teórico llamado modelo de red<sup>28</sup> (en este modelo se menciona, entre otros planteamientos, que la grieta al propagarse en estado estable deja tras de sí superficies atómicamente planas).

También sobresalen los trabajos de Pérez *et al.*,<sup>29</sup> quienes basados en un pseudopotencial de energía total<sup>30</sup> observaron la anisotropía del clivaje (esta característica fue previamente revelada en experimentos),<sup>31</sup> igualmente resaltan las de Bernstein & Hess,<sup>32,33</sup> ellos manejaron diferentes potenciales interatómicos mostrando la relevancia de los mismos en la propagación de la grieta, ya que se podía tener un comportamiento dúctil o frágil dependiendo del potencial utilizado; asimismo despuntan los realizados por Swadener *et al.*,<sup>34</sup> quienes percibieron que en muestras muy pequeñas se daba la influencia de las fronteras en la propagación de la grieta,

pero además detectaron que tanto la morfología de las superficies fracturadas como los cambios en la estructura cristalina eran función de la tasa de liberación de energía ( $G$ ).

Del mismo modo se distinguen las simulaciones de Buehler *et al.*,<sup>35</sup> ellos detectaron que los cambios cercanos a la punta de la grieta en la estructura cristalina se pueden manifestar en la velocidad instantánea de la punta de la grieta (esta característica aún no ha sido vista de forma experimental); Aldaco e Hinojosa<sup>18</sup> implementaron en muestras nanométricas una condición de frontera de reciente formulación,<sup>36</sup> lo cual permitió observar, como resultado de la propagación de la grieta, superficies lisas en los planos de clivaje y rugosas en los planos de no clivaje, así como altas velocidades promedio de propagación de la grieta en los planos de clivaje y bajas en los planos de no clivaje, siendo estas características similares a las que se han reportado en muestras más grandes utilizadas en simulaciones<sup>21,33,34</sup> y en experimentos.<sup>37-40</sup> Más adelante se desglosa la metodología general de este último trabajo,<sup>18</sup> en tanto que una explicación más amplia se tiene en el propio artículo<sup>18</sup> y en la tesis<sup>41</sup> que generó dicho trabajo.

Sin embargo, aun con resultados como los anteriormente mencionados en la fractura frágil, todavía existen hechos que carecen de explicación. Entre esos hechos se encuentra la existencia de una aparente velocidad terminal de la grieta muy inferior a la velocidad de onda de Rayleigh en el vidrio y en algunos otros materiales muy frágiles (incluyendo silicio),<sup>34, 42-46</sup> la inestabilidad dinámica de la punta de la grieta,<sup>19, 24, 35, 42-50</sup> la bifurcación simétrica 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,<sup>44</sup> etcétera.<sup>51</sup>

Algunos investigadores<sup>46</sup> han comentado que las simulaciones computacionales son una herramienta idónea para seguir buscando explicaciones a esos eventos que aún siguen sin comprenderse, sobre todo si se utilizan para diseñar los experimentos que validen el método.

Esta línea de investigación es muy dinámica y actualmente entre las tendencias del análisis por DM

de la fractura frágil se encuentran la formulación de potenciales y sus parámetros,<sup>35</sup> el planteamiento de nuevas e ingeniosas condiciones de frontera, el uso eficiente de cómputo paralelo, el perfeccionamiento de métodos de acoplamiento de modelos continuos con modelos moleculares (figura 6),<sup>52</sup> el manejo de millones de átomos,<sup>53</sup> entre otros.

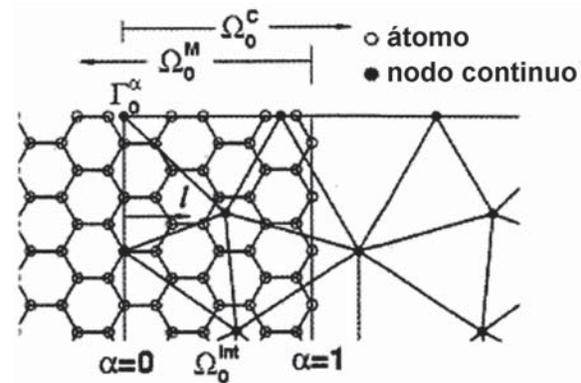


Fig. 6. Esquema manejado en <sup>52</sup> para ilustrar la intersección entre los dominios de un modelo continuo y de un modelo atómico.

## POTENCIALES INTERATÓMICOS Y CONDICIONES PARA UN ANÁLISIS POR DM

Nuestra experiencia con la DM se da al abordar un modelo de silicio preagrietado sometido a tensión uniaxial, bajo altas tasas de deformación ( $\approx 3.9 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ ). Ésta permitió generar y caracterizar la fractura dinámica de las muestras modeladas.

Para representar el comportamiento de los átomos en las muestras sólidas modeladas se manejaron tres potenciales interatómicos,<sup>27, 21, 54</sup> de entre más de 30 potenciales reportados<sup>21</sup> para el silicio, con la finalidad de estudiar la influencia de estos en la propagación de la grieta, obteniendo tanto propagación dúctil como frágil dependiendo del potencial utilizado, concordando en este punto (influencia del potencial en el tipo de fractura) con lo percibido en estudios similares por Abraham *et al.*<sup>55</sup> y por Bernstein *et al.*<sup>32, 33</sup> Cabe mencionar que los potenciales utilizados han sido reportados con diversas y bondadosas cualidades, por ejemplo el primer potencial manejado (el llamado Stilliger-Weber (SW)<sup>56</sup>) se ha mencionado<sup>21</sup> que representa excelentemente las propiedades elásticas de las muestras y que captura

bien la física no lineal involucrada en el calentamiento y la fusión, el segundo de los potenciales utilizados (una modificación al SW<sup>21</sup>) ha sido manejado en otras simulaciones de la fractura<sup>21</sup> y una de sus características es que aumenta la estabilidad de los tetraedros que conforman la estructura cristalina fcc tipo diamante que presenta el silicio, el tercer potencial (también una modificación al SW<sup>54</sup>) se dice que genera un mejor acuerdo de los valores del módulo volumétrico y de las relaciones de dispersión de fonones, lo cual da una mejor descripción de la dinámica de la red cristalina.

De entre las diversas condiciones frontera que suelen emplearse en la DM<sup>11, 57, 26</sup> se utilizaron dos, a lo largo del frente de grieta se aplicó una condición periódica que generaba una situación de deformación plana.<sup>58</sup> En tanto que en la periferia de las muestras se empleó una celda *amortiguadora* que manejaba una relativamente reciente formulación de condición frontera,<sup>36</sup> esta última (de acuerdo a los investigadores que la postularon) previene la reflexión de ondas por parte de los átomos ubicados en las fronteras del sistema, y ya que durante la fractura se esperaba que se generaran vibraciones debido a la ruptura de los enlaces interatómicos se decidió emplear esta condición, pues en el trabajo no se deseaba analizar el efecto de las vibraciones en la propagación de la grieta.

En cuanto a las ecuaciones de movimiento (tipo las ecuaciones 1 y 2) que pudieran generar la propagación de la grieta se seleccionaron las propuestas por Zhou *et al.*,<sup>24</sup> ya que éstas permiten modelar una expansión homogénea de las muestras, sin control de la temperatura, en una dirección normal a las caras iniciales de la pregrieta. Éstas favorecerían el inicio de la fractura y su consecuente propagación.

En lo que respecta al intervalo de tiempo se implementó un valor del orden de 1 femtosegundo, un valor similar fue manejado por Holland *et al.*<sup>21</sup> pues conserva bien la energía.

Además, se manejaron tres diferentes orientaciones de la estructura cristalina para que la grieta tuviera diferentes escenarios de propagación. Igualmente, a las muestras se les realizaron muescas horizontales (removiendo átomos) con el objetivo de propiciar la propagación de la fractura. Asimismo, antes de deformar las muestras se desarrollaron simulaciones

de DM canónicas para asignar diferentes temperaturas iniciales a las muestras. Listas las muestras (con cerca de 4000 átomos) se aplicó la DM fuera de equilibrio a través de la integración de las ecuaciones de movimiento, esto se hizo aplicando el algoritmo Gear predictor-corrector.

Los elementos anteriores se programaron utilizando el lenguaje Fortran y durante la ejecución de esos programas se recabaron, cada 500 pasos de tiempo, datos de posición, energía, deformación y esfuerzos a nivel atómico.<sup>17</sup> Posteriormente, a esos tres últimos tipos de datos se les dio un tratamiento en el que se les agrupaba, según las magnitudes de sus valores, para asignarles diversos colores característicos con el propósito de obtener una mejor visualización en *Xmakemol*<sup>59</sup> de los fenómenos. Adicional a esto, se calculó la velocidad promedio de la grieta,<sup>38</sup> así como la velocidad instantánea de la punta de la grieta.<sup>24</sup>

Entre algunos de los resultados obtenidos (aparte de los previamente mencionados) se tuvo que la velocidad máxima promedio calculada fue  $\approx 2$  km/s en el plano de clivaje, en los planos de no clivaje se apreció que la grieta se aceleraba y desaceleraba de forma cuasi oscilatoria (este escenario se manifestó también como una cierta rugosidad en las superficies de fractura), y además se detectó la influencia de los componentes tensoriales del esfuerzo en la trayectoria de la grieta (figura 4).

## COMENTARIOS FINALES

La dinámica molecular fuera de equilibrio y el diseño de programas computacionales como herramienta han encontrado un nicho en la física de la fractura frágil de los materiales, debido principalmente a que la naturaleza de ésta permite estudiar la evolución del proceso de ruptura de enlaces interatómicos y se puede por lo tanto explorar el comportamiento a escalas y regímenes que rebasan los límites de las teorías clásicas de la fractura (por ejemplo la teoría de Griffith y los postulados del medio continuo) y en algunos casos de la experimentación actual.

Por ejemplo ¿qué sucede en la vecindad de la punta de una grieta cuando ésta se propaga?, es precisamente esta cuestión la que origina el uso de la

DM para el estudio del fenómeno de la dinámica de la fractura frágil. Así, se ha logrado verificar algunos aspectos establecidos en modelos teóricos, también se ha conseguido reproducir hechos encontrados en experimentos, pero sobretodo, se ha podido predecir comportamientos de la fractura aún no verificados en experimentos, esto último debido a la imposibilidad actual para caracterizar detalladamente la fractura dinámica de materiales frágiles en escalas nanométricas.

Dado el dinamismo en este campo, motivado tanto por la importancia del tema como del creciente poder de cómputo y otros factores, la DM permitirá sin duda en un futuro cercano contar con capacidad de simulación multiescalar que permita una mejor comprensión de los fenómenos de nucleación y propagación de grietas que resultan en los complejos y muy conocidos, pero no explicados, patrones característicos de las superficies de fractura en diversos materiales.

## REFERENCIAS

1. Robert W. Cahn, *The Coming of Materials Science*, Elsevier Science Ltd., (2001).
2. Daan Frenkel and Berend Smit, *Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications*, Academic Press, (2002).
3. Galison, P., *Image and Logic: A material culture of microphysics*, Chapter 8 University of Chicago Press, Chicago, (1997).
4. Beeler, Jr., J. R. The role of computer experiments in materials research, en *Advances in Materials Research*, Vol. 4, ed. Herman, H. (Interscience, New York), (1970), p. 295.
5. Thomas J. R. Hughes, *The Finite Element Method*, Dover, (2000).
6. Yunus A. Cengel, Michael A. Boles, *Termodinámica* (Séptima edición), Mc Graw Hill (2011).
7. B. J. Alder and T. E. Wainwright. Molecular dynamics by electronic computers. In I. Prigogine, editor, *Proc. Of the Int. Symp. On Statistical Mechanical Theory of Transport Processes* (Brussels, 1956), Interscience, Wiley, New York, (1958), pp. 97-131.
8. J. B. Gibson, A. N. Goland, M. Milgram, and G.-H. Vineyard. Dynamics of radiation damage. *Phys. Rev.*, (1960), 120, pp. 1229-1253.
9. A. Rahman. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Phys. Rev.*, (1964), 136, pp. A405-A411.
10. M. P. Allen & D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press Inc., New York, (1987).
11. J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, Wiley Professional Paperback Edition, (1997).
12. Lennard-Jones, J. E., *Proc. Roy. Soc. (Lond.) A*, (1924), 106, 463.
13. <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.mx/2009/08/el-enlace-molecular.html>
14. Verlet, L., Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.*, (1967), 159, pp. 98-103.
15. Gear, C. W., *Numerical Initial Value Problems in ordinary Differential equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, (1971).
16. Hockney, R. W., The potential calculation and some applications, *Methods comput. Phys.*, (1970), 9, pp. 136-211.
17. Jonathan Andrew Zimmerman, *Continuum And Atomistic Modeling Of Dislocation Nucleation At Crystal Surface Ledges*, PhD thesis, Stanford University, (1999).
18. J. Aldaco, M. Hinojosa, Simulación atomística de la fractura dinámica en un material frágil, *Revista Mexicana de Física* 58 (2012) 466–471.
19. Farid F. Abraham, D. Brodbeck, R. A. Rafey and W. E. Rudge, Instability dynamics of fracture: A computer simulation investigation, *Phys. Rev. Lett.*, (1994), 73, pp. 272-275.
20. S. J. Zhou, P. S. LoDMahl, R. Thomson and B. L. Holian, Dynamic Crack Processes via Molecular Dynamics, *Phys. Rev. Lett.*, (1996), 76, pp. 2318-2321.
21. Dominic Holland and Michael Marder, Cracks and Atoms, *Adv. Mater.*, (1999), 11, pp. 793-806.

22. Wilfred F. van Gunsteren, Validation of molecular dynamics simulation, *Journal of Chemical Physics*, volume 108, number 15, 15 april 1998, p 6109-611.
23. William T. Ashurst and William G. Hoover, Microscopic fracture studies in the two-dimensional triangular lattice, *Phys. Rev. B*, (1976), 14, pp. 1465-1473.
24. P. Gumbsch, S. J. Zhou and B. L. Holian, Molecular dynamics investigation of dynamic crack stability, *Phys. Rev. B*, (1997), 55, pp. 3445-3455.
25. James F. Shackelford, *Introducción a la ciencia de materiales para ingenieros*, Madrid, Prentice Hall, 2010, 7ª. Edición, 672.
26. Dominic Holland and M. Marder, Ideal Brittle Fracture of Silicon Studied with Molecular Dynamics, *Phys. Rev. Lett.*, (1998), 80, pp. 746-749.
27. F. H. Stillinger and T. A. Weber, Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Phys. Rev. B*, (1985), 31, pp. 5262-5271.
28. M. Marder and S. Gross, Origin of crack-tip instabilities, *J. Mech. Phys. Solids*, (1995), 43, pp. 1-48.
29. Rubén Pérez and Peter Gumbsch, Directional Anisotropy in the Cleavage Fracture of Silicon, *Phys. Rev. Lett.*, (2000), 84, pp. 5347-5350.
30. J. S. Lin, A. Qteish, M. C. Payne, and V. Heine, Optimized and transferable nonlocal separable ab initio pseudopotentials, *Phys. Rev. B*, (1993), 47, pp. 4174-4180.
31. A. George and G. Michot. Dislocation loops at crack tips: nucleation and growth—an experimental study in silicon. *Mater. Sci. and Eng. A*, (1993), 164(1-2), pp. 118-134.
32. 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*, Materials Research Society, (2001), volume 653, pages Z2.7.1-Z2.7.6.
33. N. Bernstein and D. W. Hess, Lattice Trapping Barriers to Brittle Fracture, *Phys. Rev. Lett.*, (2003), 91, pp. 025501-1--025501-4.
34. J. G. Swadener, M. I. Baskes, and M. Nastasi, Molecular Dynamics Simulation of Brittle Fracture in Silicon, *Phys. Rev. Lett.*, (2002), 89, pp. 085503-1--085503-4.
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. Rev. Lett.*, (2007), 99, pp. 165502-1--165502-4.
36. Jerry Z. Yang and Xiantao Li., Comparative study of boundary conditions for molecular dynamics simulations of solids at low temperature, *Phys. Rev. B*, (2006), 73, pp. 224111-1—224111-10.
37. J. A. Hauch, D. Holland, M. P. Marder and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.*, (1999), 82, 3823.
38. T. Cramer, A. Wanner and P. Gumbsch, *Phys. Rev. Lett.*, (2000), 85, 788.
39. B. Lawn, *Fracture in Brittle Solids*, Cambridge University Press, second edition, 1993.
40. K. Ravi-Chandar, *Dynamic Fracture*, Elsevier Ltd, The Boulevard, Langford Lane, Kidlington, Oxford OX5 1GB, UK, 2004.
41. Jorge Adrián Aldaco Castañeda, *Simulación Atómica de la Fractura Dinámica en un Material Frágil*, Tesis de Doctorado, Universidad Autónoma de Nuevo León, (2011).
42. E. Sharon and J. Fineberg, The Dynamics of Fast Fracture, *Adv. Eng. Mat.*, (1999), 1, pp. 119-122.
43. J. Fineberg, S. P. Gross, M. Marder and H. L. Swinney, Instability in dynamic fracture, *Phys. Rev. Lett.*, (1991), 67, pp. 457--460.
44. M. Marder and Xiangming Liu, Instability in lattice fracture, *Phys. Rev. Lett.*, (1993), 71, pp. 2417-2420.
45. F. F. Abraham, D. Brodbeck, W. E. Rudge and X. Xu, A Molecular Dynamics Investigation of Rapid Fracture Mechanics, *J. Mech. Phys. Solids*, (1997), 45, pp. 1595-1619.
46. J. Fineberg and M. Marder, Instability in Dynamic Fracture, *Physics Reports*, (1999), 313, pp. 1-108.
47. Farid F. Abraham, D. Schneider, B. Land, D. Lifka, J. Skovira, J. Gerner, M. Rosenkrantz,

- Instability dynamics in three-dimensional fracture: An atomistic simulation, *J. Mech. Phys. Solids*, (1997), 45, pp. 1461-1471.
48. T. Cramer, A. Wanner and P. Gumbsch, Crack velocities during dynamic fracture of glass and single crystalline silicon, *Phys. Status Solidi (a)*, (1997), 164, R5.
49. F. F. Abraham, The atomic dynamics of fracture, *J. Mech. Phys. Solids*, (2001), 49, pp. 2095-2111.
50. 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*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2007), volume 105, pp. 39-45.
51. L. B. Freund. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge, University Press, Cambridge, UK, second edition, (1998).
52. T. Belytscko and S. P. Xiao, Coupling Methods for Continuum Model with Molecular Model, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, (2003), 1(1), pp. 115-126.
53. Nicholas Allsopp, Giancarlo Ruocco, Andrea Fratallocchi, Molecular dynamics beyond the limits: massive scaling on 72 racks of a BlueGene/P and supercooled glass transition of a 1 billion particles system, arXiv: 1105.5613v1 [cond-mat.stat-mech] 27 May 2011.
54. Z. Jian, Z. Kaiming, and X. Xide, Modification of Stillinger-Weber potentials for Si and Ge, *Phys. Rev. B*, (1990), 41, pp. 12915-12918.
55. F. F. Abraham, J. Q. Broughton, N. Bernstein and E. Kaxiras, Spanning the continuum to quantum length scales in a dynamic simulation of brittle fracture, *Europhysics Letters*, (1998), 44, pp. 783-787.
56. F. H. Stillinger and T. A. Weber, *Phys. Rev. B*, (1985), 31, 5262.
57. B. de Celis, *Molecular Dynamics Simulation studies in fracture mechanics*. PhD thesis, (1982), Massachusetts Institute of Technology.
58. George Ellwood Dieter. *Mechanical Metallurgy*, McGraw-Hill, third edition, 1986.
59. M. P. Hodges, Xmakemol, A program for visualizing atomic and molecular, version 5, 2001.

**Anúnciense en:**

# Ingenierías



**INFORMES:**  
Tel: (52) (81) 83294020 Ext. 5854  
Fax: (52) (81) 83320904  
E-mail: [revistaingenierias@gmail.mx](mailto:revistaingenierias@gmail.mx)  
Internet: <http://ingenierias.uanl.mx>