

Wilmer Velilla-Díaz

Efecto de las fronteras de grano en la tenacidad a la fractura de materiales nano-cristalinos fisurados

Tesis doctoral

Para el grado de Doctor en Ingeniería Mecánica

Barranquilla, Mayo 2019

Universidad del Norte

División de Ingenierías

Departamento de Ingeniería Mecánica



UNINORTE

Universidad del Norte

Tesis para el grado de Doctor en Ingeniería Mecánica

División de Ingenierías

Departamento de Ingeniería Mecánica

Agradecimientos

El proyecto de investigación presentado en esta tesis fue desarrollado durante los años 2015-2019 en el departamento de Ingeniería Mecánica, de la Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. Este proyecto fue financiado por Colciencias a través del programa nacional de doctorados nacionales convocatoria N° 647 (2015) y la Universidad del Norte bajo el número de contrato UN-OJ-2015-29312.

Gracias al Ph.D Habib Zambrano, por enseñarme un enfoque adecuado de investigación en el área de mecánica de la fractura y por el gran apoyo recibido en este proyecto.

Gracias al Ph.D Alejandro Pacheco por su guía para desarrollar esta investigación fundamentando en teorías de la mecánica del medio continuo y de dinámica molecular, agradecido también por su apoyo en las pasantías realizadas en la Universidad Técnica Federico Santa María, es la experiencia profesional más enriquecedora en lo corrido de mi vida.

Gracias al Ph.D Harvey Zambrano, por su disposición para realizar charlas técnicas y científicas.

Gracias a mis amigos, Roger Pinzón, agradecido con Dios por contar con tu apoyo y amistad incondicional. Gracias Diego Mendoza por tus recomendaciones, apoyo, consejos y asesorías sin interés durante este proceso, le pido a Dios que los guarde siempre y los mantenga en el correcto vivir, para que sigan siendo testimonio, mostrando con sus vidas que el trabajo fuerte y realizado con excelencia e integridad siempre trae grandes recompensas.

Gracias a mi Suegra Lesbia García, una mujer que me ha aceptado y amado como un hijo, cuanto agradezco a Dios por su vida, gracias nuevamente por su apoyo incondicional en este proceso.

Gracias a mi Padre Carlos Velilla, por tus consejos y apoyo, a pesar de los momentos difíciles vividos con tu salud, ahora eres milagro y testimonio del poder de Dios.

Gracias a mi Madre Emilse Diaz, todos los logros que he alcanzado sin dudas alguna ha sido en gran parte gracias a ti mamá, tu amor, tu guía, tu constancia y apoyo en todas las áreas de mi vida es incondicional.

Victoria hija mía, eres el motivo por el cual lucho más cada día, me has hecho mejor persona, me has enseñado un nuevo significado de amor, me esmeraré por ser un buen ejemplo para ti, espero poder enseñarte y guiarte para que alcances tus objetivos. Te amo.

Gracias a mi esposa Melissa Parejo, por el apoyo, la paciencia, el amor y los sacrificios que has tenido que hacer para que yo logre este objetivo. Le doy gracias a Dios por bendecirme más de lo que yo esperaba con tu vida. Te amo.

Por último y el más importante, eres tu mi Dios, quiero agradecerte y dedicarte este título, Gracias por darme sabiduría y conocimiento para desarrollar este trabajo. Gracias por darme el querer como el hacer en tiempos de dificultad durante esta investigación, sin ti mi Dios nada de esto hubiera sido posible. Toda la gloria sea para Ti.

Índice General

| | |
|--|------|
| AGRADECIMIENTOS | I |
| RESUMEN | VIII |
| NOMENCLATURA | IX |
| CAPÍTULO 1 | 1 |
| INTRODUCCIÓN | 1 |
| 1.1 OBJETIVO PRINCIPAL Y MOTIVACIÓN | 1 |
| 1.2 MATERIALES NANO-CRISTALINOS | 1 |
| 1.3 PARÁMETROS DE LA MECÁNICA DE LA FRACTURA | 2 |
| 1.4 ORGANIZACIÓN DE LA TESIS | 3 |
| CAPÍTULO 2 | 5 |
| SIMULACIONES MOLECULARES | 5 |
| 2.1 INTRODUCCIÓN | 5 |
| 2.2 MECÁNICA ESTADÍSTICA | 5 |
| 2.2.1 Ensamblés termodinámicos | 6 |
| 2.3 DINÁMICA MOLECULAR | 6 |
| 2.3.1 Cálculo de posiciones y velocidades de los átomos. | 7 |
| 2.3.2 Lista de átomos vecinos y cutoff | 8 |
| 2.3.3 Algoritmos de integración usados en DM | 9 |
| 2.3.4 Condiciones de frontera periódicas | 9 |
| 2.3.4 Cálculo de propiedades..... | 10 |
| 2.4 POTENCIAL INTERATÓMICO EN ALUMINIO | 11 |
| 2.4.1 Potencial de pares | 12 |
| 2.4.2 Campos de fuerzas para materiales biológicos y polímeros | 13 |
| 2.4.3 Método del átomo embebido (EAM) para metales | 13 |
| 2.5 SELECCIÓN DEL POTENCIAL INTERATÓMICO | 14 |

| | |
|---|----|
| CAPÍTULO 3..... | 15 |
| CONSTRUCCIÓN Y EJECUCIÓN DE EXPERIMENTOS COMPUTACIONALES..... | 15 |
| 3.1 INTRODUCCIÓN..... | 15 |
| 3.2 CONSTRUCCIÓN DE LAS GEOMETRÍAS..... | 15 |
| 3.3 ETAPAS DE LA SIMULACIÓN DEL ENSAYO DE TENSIÓN UNIAXIAL..... | 16 |
| 3.4 MODELACIÓN PRELIMINAR PARA VALIDAR EL CÁLCULO DE ESFUERZOS EN EL MONOCRISTAL. | 17 |
| 3.5 MODELACIÓN DEL MONOCRISTAL Y BICRISTAL..... | 17 |
| 3.6 RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DEL ENSAYO DE TENSIÓN UNIAXIAL EN MONOCRISTAL Y BICRISTAL DE ALUMINIO..... | 19 |
| 3.7 DISCUSIÓN..... | 22 |
| 3.8 CONCLUSIONES..... | 22 |
| CAPÍTULO 4..... | 23 |
| TENSOR DE ESFUERZOS LOCAL..... | 23 |
| 4.1 INTRODUCCIÓN..... | 23 |
| 4.2 CAMPO DE ESFUERZOS LOCAL PARA NANOCRISTALES DE ALUMINIO..... | 23 |
| 4.3 VERIFICACIÓN DE LOS ESFUERZOS LOCALES EN MONOCRISTAL..... | 25 |
| 4.4 RESULTADOS DE ESFUERZOS LOCALES EN MONOCRISTAL Y BICRISTAL..... | 28 |
| 4.5 DISCUSIÓN..... | 29 |
| 4.6 CONCLUSIONES..... | 29 |
| CAPÍTULO 5..... | 30 |
| MECÁNICA DE LA FRACTURA..... | 30 |
| 5.1 INTRODUCCIÓN..... | 30 |
| 5.2 MECÁNICA DE LA FRACTURA..... | 30 |
| 5.3 ESTIMACIÓN DE K_I | 31 |
| 5.4 ESTIMACIONES DE J | 33 |
| 5.4.1 Velocidad de liberación de energía de deformación..... | 33 |
| 5.4.2 Integral J de contorno..... | 34 |
| 5.4.3 Desplazamiento de la abertura de la punta de la fisura CTOD..... | 36 |

| | |
|---|----|
| 5.5 PROPAGACIÓN DE LAS NANO-FISURAS | 37 |
| 5.6 RASGAMIENTO Y FRACTURA..... | 37 |
| 5.7 DISCUSIÓN..... | 39 |
| 5.8 CONCLUSIONES | 39 |
| CAPÍTULO 6..... | 41 |
| METODOLOGÍA PARA ESTIMAR LA TENACIDAD A LA FRACTURA EN CRISTALES Y BICRISTALES DE ALUMINIO..... | 41 |
| 6.1 INTRODUCCIÓN..... | 41 |
| 6.2 TENACIDAD A LA FRACTURA K_C | 41 |
| 6.3 TENACIDAD A LA FRACTURA J_C | 42 |
| 6.4 DISCUSIÓN..... | 43 |
| 6.5 CONCLUSIONES | 44 |
| CAPÍTULO 7 | 45 |
| CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS..... | 45 |
| 7.1 CONCLUSIONES | 45 |
| 7.2 TRABAJO FUTUROS | 45 |
| BIBLIOGRAFÍA | 47 |

Listado de Figuras

| | |
|--|----|
| Fig. 1. Representación esquemática del sistema atomístico con partículas. | 7 |
| Fig. 2. Esquema de sistema de partículas con condiciones de frontera periódicas. | 10 |
| Fig. 3. (a) Interacciones del átomo uno y (b) del átomo con cinco átomos cercanos en un r_{cutoff} | 12 |
| Fig. 4. Comportamiento típico de φ en función de la distancia relativa entre átomos para metales. | 12 |
| Fig. 5. Diferencia en las propiedades de los enlaces entre átomos cercanos a superficies libre. | 13 |
| Fig. 6. Representación física de materiales a diferentes escalas. | 16 |
| Fig. 7. (a) Monocristal fisurado después del equilibrio; (b) esquema con dimensiones de nano-fisura y (c) sistema atomístico. | 17 |
| Fig. 8. (a) Inclinación del arreglo del grano 2 para GB inclinada y (b) rotación del grano 2 en GB rotada. | 18 |
| Fig. 9. (a) Configuración del bicristal y (b) dimensiones de la fisura para $l_0 = 15a$ | 18 |
| Fig. 10. Bicristal fisurado en equilibrio mostrando la frontera de grano. | 19 |
| Fig. 11. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para el bicristal con $l_0 = 5a$, parte superior: comportamiento del monocristal y en la derecha: comportamiento del bicristal con el análisis de dislocaciones DXA implementado en OVITO. | 19 |
| Fig. 12. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para el bicristal con $l_0 = 10a$, parte superior: comportamiento del monocristal y en la derecha: comportamiento del bicristal con el análisis de dislocaciones DXA implementado en OVITO. | 20 |
| Fig. 13. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para bicristal con $l_0 = 15a$. Parte superior: comportamiento del monocristal y la derecha: bicristal con DXA implementado en OVITO. | 21 |
| Fig. 14. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para bicristal con $l_0 = 20a$. Parte superior: presenta comportamiento del monocristal y la derecha: bicristal con DXA implementado en OVITO. | 21 |
| Fig. 15. Esquema del volumen representativo para determinar propiedades locales. | 24 |
| Fig. 16. Análisis del comportamiento de los esfuerzos locales en el monocristal. | 26 |
| Fig. 17. Campo de esfuerzos σ'_{zz} en monocristales con diferentes l_0 | 28 |
| Fig. 18. Campo de esfuerzos σ'_{zz} en la izquierda para el monocristal y en la derecha para el bicristal de aluminio. | 29 |
| Fig. 19. Modo de carga I. | 31 |
| Fig. 20. σ vs. ϵ_{zz} para un monocristal sin defectos. | 32 |
| Fig. 21. σ vs. ϵ_{zz} para monocristal y bicristal. | 33 |
| Fig. 22. W y U durante el ensayo de tensión para el bicristal con $l_0 = 20a$ | 33 |

| | |
|---|----|
| Fig. 23. Camino seleccionado para evaluar la integral J de contorno..... | 34 |
| Fig. 24. σ_{zz}^3 para (a) monocristal a $\epsilon_{zz} = 6.9\%$; (b) bicristal a $\epsilon_{zz} = 6.6\%$ | 35 |
| Fig. 25. CTOD (a) monocristal con $l_0 = 10a$; (b) bicristal después del primer rasgamiento con $l_0 = 10a$ | 36 |
| Fig. 26. CTOD vs. ϵ_{zz} para (a) monocristales y (b) bicristales. | 36 |
| Fig. 27. (a) Propagación de fisura en monocristal a $\epsilon_{zz} = 6.8\%$; (b) primer rasgamiento a $\epsilon_{zz} = 6.5\%$; y (c) fractura final bicristal con coalescencia de vacancias en el segundo cristal a $\epsilon_{zz} = 30\%$ | 37 |
| Fig. 28. Valores máximos de J para monocristales (SC) y para primer rasgamiento (FT) en bicristales. | 37 |
| Fig. 29. DXA en bicristales con $l_0 = 10a$ (a) antes del primer rasgamiento ($\epsilon_{zz} = 6.6\%$); y (b) después del primer rasgamiento ($\epsilon_{zz} = 6.7\%$). | 38 |
| Fig. 30. Máximos J para monocristales (SC) y bicristales (BC)..... | 38 |
| Fig. 31. Esfuerzo normalizado σ_{zz}/S_U vs. l_0/L para estimar K_C | 42 |
| Fig. 32. Esfuerzo equivalente normalizado estimado mediante (a) CI (b) ERR y (c) CTOD. | 43 |

Listado de tablas

| | |
|---|----|
| Tabla 1. Funciones del potencial interatómico propuesto por Mendeleev et al. | 14 |
| Tabla 2. Comparación entre σ'_{zz} y σ_{zz} DM en monocristal con ca. 16,000 átomos. | 27 |
| Tabla 3. Reducción del esfuerzo global máximo en monocristal con ca. 16,000 átomos. | 27 |
| Tabla 4. K_I para monocristal, primer rasgamiento en el bicristal y falla final en el bicristal. | 32 |
| Tabla 5. Datos usados para el cálculo de las máximas J | 39 |
| Tabla 6. Valores máximos de J | 39 |
| Tabla 7. Tenacidad a la fractura para el monocristal y el bicristal. | 43 |
| Tabla 8. Error de mínimos cuadrados para cada método. | 44 |

Resumen

Las limitaciones de la mecánica del medio continuo para predecir el comportamiento de materiales a escala nanométrica han conducido al desarrollo de modelos a nivel atómico para describir su comportamiento mecánico. La solución de un modelo atómico para describir el comportamiento del material permite conocer sus posibles configuraciones de equilibrio haciendo posible calcular, a través de la mecánica estadística, propiedades físicas y químicas a nivel macroscópico. El poder de predicción de los resultados obtenidos en simulaciones a nivel atómico está determinado por la exactitud de la descripción de la energía en el material i.e., potencial interatómico en el caso de las simulaciones de Dinámica Molecular, los métodos de solución utilizados para integrar el sistema de ecuaciones resultante bajo diferentes tipos de ensamble (NVE, NPT) y el tamaño del sistema mismo (número de partículas). Se han desarrollado múltiples trabajos basados en simulaciones a nivel atómico para describir la resistencia de materiales poli-cristalinos en función del tamaño de grano. Simulaciones de pruebas cuasi-estáticas de carga por nano-indentación han permitido constatar los índices de resistencia para materiales con tamaños de grano a escala nanométrica.

Para el estudio del comportamiento de nano-materiales fisurados se han utilizado una serie de metodologías derivadas en su mayoría de la Teoría de la Mecánica de Fractura: desplazamiento de la abertura de la punta de la fisura (CTOD, por sus siglas en inglés), la integral J y la velocidad de liberación de la energía de deformación (ERR, por sus siglas en inglés). Los resultados de simulaciones implementando dinámica molecular ha evidenciado un incremento de hasta 10 veces el valor de algunas propiedades de los nano-materiales respecto al valor de la misma propiedad en el material con tamaño de grano convencional, tal es el caso de la resistencia de la fluencia. Debido a la presencia de la energía de las fronteras de grano aparece una contribución energética no tenida en cuenta en la teoría clásica del continuo. La influencia energética de las fronteras de grano aumenta a medida que el tamaño promedio de grano disminuye haciendo que la fracción volumétrica de estas estructuras puede llegar a ser hasta la mitad del volumen para una muestra con tamaño de grano de aproximadamente 1-4 nm.

Actualmente la tenacidad a la fractura ha sido estimada en escala nano-métrica usando los modelos CTOD, integral J y ERR, para un tamaño específico de fisura inicial en cristales simples, bicristales y policristales. Incluso, han surgido nuevas teorías que intentan conciliar las observaciones experimentales con los modelos teóricos que describen el comportamiento de materiales fracturados. Dentro de estas aproximaciones al problema podemos encontrar la teoría de mecánica de la fractura discreta (DFM, por sus siglas en inglés) y la teoría de mecánica de la fractura cuántica (QFM, por sus siglas en inglés) [1,2]. En la presente investigación se desarrolló una nueva metodología para estimar un valor de tenacidad a la fractura que sea válido para cualquier tamaño de fisura inicial en un cristal simple y en un bicristal sujeto a cargas en modo I. Los resultados permitieron identificar que la tenacidad a la fractura en el bicristal es casi cinco veces el valor de del observado en el cristal simple.

Nomenclatura

Abreviaturas

| | |
|----------|--|
| BC | bicristal |
| CTOD | desplazamiento de la apertura de la punta de la fisura |
| DM | dinámica molecular |
| EAM | método del átomo embebido |
| ERR | velocidad de liberación de energía de deformación, J m^{-2} |
| FCC | cubica centrada en las caras |
| FT | primer rasgamiento |
| GB | frontera de grano |
| LEFM | mecánica de la fractura lineal elástica |
| NC | nanocristalino |
| NEMS | sistemas nano-electromecánicos |
| NPT | ensamble isotérmico-isobárico |
| NVE | ensamble microcanónico |
| NVT | ensamble canónico |
| μVT | ensamble macrocanónico |
| SC | monocristal |

Letras latinas

| | |
|-------------------|--|
| a | parámetro de red, m |
| A | propiedad del material |
| B | función de enlace |
| e, q | números enteros |
| E | módulo de elasticidad, Pa |
| f | factor geométrico de la fisura |
| $F_{\alpha\beta}$ | fuerza en la partícula α ejercida por la partícula β , N |
| h | longitud de suavizado, m |
| H | energía total del sistema, J |
| J | integral J , J m^{-2} |
| J_C | tenacidad a la fractura, J m^{-2} |
| k_B | constante de Boltzmann, J K^{-1} . |
| K | energía cinética, J |
| K_I | factor de intensificación de esfuerzos modo I, $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ |
| K_C | tenacidad a la fractura, $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ |
| l | tamaño de la fisura, m |
| l_0 | tamaño de fisura inicial, m |
| L | longitud de la caja de simulación, m |
| L_1, L_2 | vectores de los bordes de la caja de simulación, m |
| p | cantidad de movimiento, kg m/s |
| P | presión del sistema, Pa |

| | |
|-------------------|--|
| m | masa del átomo, kg |
| n | vector unitario normal a una trayectoria |
| N | número de átomos en el sistema |
| r | posición del átomo, m |
| \dot{r} | velocidad del átomo, m/s |
| \ddot{r} | aceleración del átomo, m/s ² |
| $r_{\alpha\beta}$ | distancia relativa entre átomos α y β , m |
| R | punto material, m |
| S_U | esfuerzo último a la tensión, Pa |
| t | espesor, m |
| T | temperatura, K |
| T_i | vector de tracción, Pa |
| u_i | componentes del vector de desplazamientos, m |
| U | energía potencial, J |
| U_d | Energía de deformación liberada, J |
| v | velocidad del átomo, m/s |
| V | volumen, m ³ |
| w | densidad de energía de deformación, Pa |
| W | trabajo externo, J |

Letras griegas

| | |
|---|---|
| Γ | camino para evaluar la integral J |
| ε | deformación unitaria |
| $\dot{\varepsilon}$ | velocidad de deformación, s ⁻¹ |
| ζ | ángulo de frontera de grano torcida |
| η, ϵ | coeficientes de potencial de Lennard-Jones |
| θ | ángulo de frontera de grano inclinada |
| λ | variable de integración de Hardy |
| ν | coeficiente de Poisson |
| ξ | altura del sistema atómico a una deformación dada, m |
| Π | energía potencial del sistema |
| ρ_α | contribución del átomo α -ésimo a la densidad local de electrones |
| $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ | esfuerzo global del sistema, Pa |
| σ'_{ij} | tensor de esfuerzos de Cauchy local calculado con método de Hardy |
| $\bar{\sigma}'_{ij}$ | promedio de los tensores de esfuerzos de Cauchy locales |
| σ_o | esfuerzo máximo global del sistema durante el ensayo de tensión |
| τ | variable temporal, s |
| φ | contribución del potencial de pares a la energía de cohesión, J |
| Φ | energía de embebimiento, J |
| ψ | contribución de los átomos β a la densidad electrónica del átomo α |
| Ψ | función de localización |

Subíndice y superíndice

| | |
|-----------------|---|
| 0 | inicial |
| f | final |
| p | segmento de camino para evaluar la integral J |
| i, j | componentes vectoriales |
| x, y, z | direcciones |
| α, β | átomos o partículas |

Capítulo 1

Introducción

1.1 Objetivo principal y motivación

Los materiales nano-cristalinos (tamaño promedio de grano menor a 100 nm) han permitido el desarrollo de sistemas nano-electromecánicos (NEMS, por sus siglas en inglés), los cuales tienen un gran espectro de aplicaciones en diversos campos [3–8]. En el área de la salud, se han desarrollado nano-robots empleados en procedimientos quirúrgicos molecular y la dosificación de medicamentos para el tratamiento de enfermedades consideradas terminales como el cáncer [6]. Otra aplicación a resaltar por su impacto es el arreglo de nano-canales para obtener agua potable a partir de agua salada [9] y el desarrollo de micro-motores de diámetro de 250 μm para aplicaciones médicas [10]. El gran rango de aplicaciones y las propiedades mecánicas excepcionales de este tipo de materiales ha hecho que el estudio de materiales nano-cristalinos sea un campo de investigación muy activo. A pesar de sus evidentes ventajas, la predicción de las propiedades físicas y químicas de estos materiales sigue siendo un reto en la actualidad debido a la ausencia de una teoría que explique y permita predecir la dinámica de su deformación bajo diferentes condiciones de carga. Trabajos previos han demostrado que sus propiedades mecánicas (e.g., esfuerzo último a tensión S_U y la tenacidad a la fractura K_C, J_C) a medida que disminuye el tamaño promedio de grano son de orden de magnitud superior al compararlas con materiales de mayor tamaño de grano de la misma especie (S_U del orden de 1GPa) [11–19]. Incluso se ha demostrado que teorías como la relación tradicional de Hall-Petch no describe correctamente la relación del tamaño de grano con su resistencia a la tensión en esta escala [20,21]. Así mismo, se ha demostrado que la presencia de defectos y fronteras de grano (GBs, por sus siglas en inglés) en la estructura determina el comportamiento mecánico [22–31].

El principal objetivo de esta tesis es estimar el efecto de la GB en la tenacidad a la fractura mediante la comparación de la tenacidad a la fractura de un bicristal con la de un monocristal de aluminio. Para estimar la tenacidad a la fractura a escala nano-métrica, se desarrolló una metodología novedosa para obtener un valor de tenacidad que fuera válido para cualquier tamaño de fisura. Con esta metodología se propone un procedimiento para estimar un valor de tenacidad a la fractura en materiales NC, el cual no depende del tamaño inicial de fisura.

1.2 Materiales nano-cristalinos

Los materiales nano-cristalinos (NC) se caracterizan por tener una alta fracción volumétrica de frontera de grano que altera significativamente sus propiedades físicas, mecánicas y químicas en comparación con los materiales policristalinos de tamaño de grano convencional [21,31–35]. Razón por la cual, existen algunas teorías de la Mecánica de medios continuos que no son suficientes Para explicar los diferentes fenómenos que se dan en la escala nanométrica, como es el

caso de la relación de Hall-Petch [36–38]. En este sentido, el objetivo de muchas investigaciones ha sido validar o encontrar nuevas teorías que describan el comportamiento de los materiales NC. En especial las teorías que incluyen irreversibilidades en los sólidos NC (rompimiento de enlaces atómicos), como es el caso de la deformación plástica y fluencia [39–42], el comportamiento frente a cargas de fatiga [19,43–45] y la mecánica de la fractura [2,29,46–50]. La investigación actual abarca la última temática mencionada y se concentra en estudiar el comportamiento de monocristales y bicristales de aluminio con defectos iniciales para estimar la tenacidad a la fractura y la alteración de esta propiedad debido a la presencia de fronteras de grano.

1.3 Parámetros de la Mecánica de la fractura

La mecánica de la fractura estudia el comportamiento de las fisuras en los sólidos [51]. La resistencia de un material a la propagación inestable de una fisura en su interior (fractura frágil) está medida por la tenacidad a la fractura. Cuando la fractura es dúctil, la propagación se caracteriza por estar acompañada de una deformación plástica significativa y algunas veces del proceso de rasgamiento [51].

Históricamente, se desarrollaron primero dos enfoques para el análisis de la fractura frágil, los cuales conforman la mecánica de la fractura lineal elástica (LEFM por sus siglas en inglés). El primero es el criterio de la velocidad de liberación de la energía (ERR) y el segundo consiste en la aproximación del intensificador de esfuerzos (K_I). Estos dos enfoques son equivalentes en ciertas circunstancias. ERR plantea que la propagación de la fisura ocurre de forma inestable cuando la energía invertida para el crecimiento de una fisura es mayor a la resistencia del material. Inicialmente, Griffith en 1920 propuso este enfoque energético basado en un nuevo criterio de ruptura: el estado de equilibrio (mínima energía), debe ser después de una ruptura del sólido, acompañada de una reducción continua en su energía potencial. Griffith consideró que la energía potencial total en un material fisurado estaba compuesta por la energía potencial asociada a la deformación y la energía requerida para crear una nueva superficie. A partir de este balance, planteó una metodología para estimar el esfuerzo requerido para que la fisura se propague de forma inestable en un material. Sin embargo, Irwin [52] en 1956 desarrolló el concepto de ERR a partir de la teoría planteada por Griffith. ERR resultó ser más útil para resolver los problemas de ingeniería de esa época y comenzó a ser conocido como el parámetro de la mecánica de la fractura requerido para calcular la tenacidad a la fractura [53]. El segundo método utiliza una aproximación del intensificador de esfuerzos K_I , en este método se asume que el material fallará localmente debido a una combinación crítica de esfuerzo y deformación en la punta de la fisura, el intensificador de esfuerzos en este punto crítico se define como la tenacidad a la fractura (K_C) [53].

Posteriormente, en los 1960s se comenzó a observar que la LEFM no predecía correctamente el inicio de la propagación de la fisura cuando se presentaba una deformación plástica significativa antes de la falla. Esto dio inicio al desarrollo de nuevos parámetros para la mecánica de la fractura de materiales elasto-plásticos. En 1961, Wells [54] desarrolló el concepto de tamaño de la apertura de la punta de la fisura (CTOD por sus siglas en inglés) y planteó una relación entre K_I y la CTOD. Y en ese mismo año, Irwing [55] estableció una corrección en la zona plástica para establecer una relación entre el CTOD y la ERR [53]. En 1968, Rice [56] desarrolló otro parámetro de la mecánica de la fractura para materiales no lineales. Rice generalizó la ERR para materiales no lineales y demostró que esta ERR no lineal podía ser expresada como una integral de línea a lo largo de cualquier camino que envolviera a la fisura, a este parámetro Rice lo llamó la integral J .

1.4 Organización de la tesis

El trabajo actual está escrito en el orden que se presenta a continuación. El capítulo 2 contiene una introducción a los conceptos y teorías usadas en la técnica de simulación de dinámica molecular (DM). Además, se presentan los diferentes potenciales interatómicos utilizados en las simulaciones DM junto con las ecuaciones que los gobiernan y se detalla el funcionamiento del potencial implementado para los metales conocido como el método del átomo embebido (EAM). En el capítulo 3, inicialmente se indican los procedimientos seguidos para la construcción de los especímenes y la estrategia de simulación para el ensayo de tensión uniaxial bajo control de desplazamiento, asimismo, se presentan los resultados del ensayo de tensión para los diferentes monocristales y bicristales mediante sus curvas de esfuerzo vs. deformación. En el capítulo 4 se presenta el procedimiento para realizar el cálculo del tensor de esfuerzos de Cauchy local a partir de los resultados de las simulaciones de DM usando el método propuesto por Hardy [57]. En el capítulo 5 se hace una introducción a las teorías usadas para estimar los parámetros de la mecánica de la fractura K_I , integral J , CTOD y ERR. Además, se introduce el concepto de primer rasgamiento para el primer cristal en los bicristales y los criterios para considerar la falla del material durante los ensayos computacionales. El capítulo 6 contiene la metodología para estimar la tenacidad a la fractura válida para todos los tamaños de fisura inicial evaluados en monocristales y bicristales de aluminio. Inicialmente, en este capítulo se estudia el efecto de la GB sobre la tenacidad K_C y se observa que el K_C estimado para el monocristal coincide con las magnitudes reportadas por otros investigadores, seguidamente se obtiene que K_C para el bicristal es casi 2.5 veces el K_C del monocristal. Posteriormente, se estimó la tenacidad a la fractura considerando fractura elasto-plástica en función de J y se encontró que la tenacidad a la fractura J_C para el monocristal coincidía con el orden de magnitud reportado en la literatura, asimismo se observó que J_C para el bicristal es de casi cinco veces el J_C para el monocristal. Esta metodología fue publicada en el journal “Computational Materials Science”, bajo el título: “The role of the grain boundary in the fracture toughness of aluminum bicrystal” [58]. Finalmente, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones y sugerencias en trabajos futuros. A continuación, se relacionan los productos de esta tesis hasta el momento.

PONENCIAS EN CONGRESOS INTERNACIONALES

XVI Jornadas de Mecánica Computacional

Título de la ponencia: *“Influencia de las fronteras de grano en la propagación de nano-fisuras”*
Lugar: La Serena, Chile. Año: 2017.

XVII Congreso Chileno de Ingeniería Mecánica | COCIM 2017

Título de la ponencia: *“Influencia del tamaño de fisuras en la distribución de esfuerzos locales durante la propagación de fisuras en materiales nano-cristalinos”*
Lugar: Santiago de Chile, Chile. Año: 2017.

IX Congreso Internacional de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica VII Congreso Internacional de Ingeniería Mecatrónica y Automatización

Título de la ponencia: “*Comportamiento mecánico de bicristales de aluminio con nano-fisuras sujetos a tensión uniaxial.*”

Lugar: Bogotá, Colombia. Año: 2019.

PUBLICACIÓN EN JOURNAL ISI/SCOPUS

Nombre del Journal: Computational Materials Science

Título de la publicación: “The role of the grain boundary in the fracture toughness of aluminum bicrystal”. [58]

ISSN 0927-0256. Vol. 167 (2019), pp. 34-41.

Capítulo 2

Simulaciones moleculares

2.1 Introducción

Las simulaciones moleculares representan los sistemas físicos (gas, líquido o sólido) como una colección de partículas (átomos considerados como partículas) y utilizan un potencial interatómico para estimar el comportamiento entre dichas partículas. El método de dinámica molecular (DM) comienza a ser implementado en los años 1950's con Alder y Wainwright quienes estudiaron las interacciones entre esferas sólidas, considerando que la fuerza en una partícula, dentro de un sistema de múltiples partículas, en cualquier instante, debe considerar la influencia de cada partícula vecina [59,60]. Posteriormente en 1964 Rahman y Stillinger en 1974 hicieron las primeras simulaciones usando DM para estudiar el comportamiento de fluidos [61,62]. Los primeros estudios que incluyeron simulaciones de DM para modelar el proceso de fractura fue en los 1970s, cuando Ashurt y Hoover estudiaron cristales de 512 partículas con defectos y encontraron que los resultados para la energía, entropía, concentración de esfuerzos y comportamiento de la fisura era consistente con las teorías macroscópicas de elasticidad [63]. En 1983, Yip et al., usaron DM para estudiar la propagación de fisuras y el comportamiento de la punta de la fisura en hierro- α y cobre; en este trabajo encontraron que se formaban dislocaciones parciales en la punta de la fisura [64]. En 1998, Shastry y Farkas usaron estática molecular para estudiar la propagación de fisuras en CoAl y FeAl, con los resultados de las simulaciones estimaron la energía de superficie por el método de Griffith [65]. Posteriormente, Farkas et al., encontraron la influencia de la orientación cristalográfica en el factor de intensificación de esfuerzos en modo I (K_I) usando simulaciones de DM en Fe [66] y hasta la actualidad se ha utilizado la DM para obtener indicadores del comportamiento mecánico de los materiales NC. En este capítulo se hace una introducción de los principios fundamentales de la técnica de DM, los algoritmos de integración numérica, las condiciones de frontera, la hipótesis Ergódica y la importancia de la selección del potencial interatómico para obtener una descripción correcta de los fenómenos estudiados. Finalmente, se discute en la sección 2.5 la selección del método del átomo embebido (EAM) para estudiar el proceso de la propagación de nano-fisuras.

2.2 Mecánica estadística

Esta teoría permite estimar propiedades macroscópicas de los materiales a partir de las propiedades microscópicas de sus átomos, es decir, la mecánica estadística utiliza las posiciones y cantidad de movimiento de los átomos de un sistema para estimar propiedades macroscópicas, tales como: presión, temperatura, tensor de esfuerzo, tensor de deformación, energía, entre otros. El teorema que se utiliza para relacionar las propiedades microscópicas con las macroscópicas de un sistema es la hipótesis Ergódica de Boltzman, la cual plantea que el promedio de una propiedad A en el tiempo es igual a su promedio en un ensamble. El promedio en un ensamble hace referencia al promedio sobre todas las configuraciones posibles del sistema, consideradas simultáneamente.

(Los tipos de ensambles termodinámicos se mostrarán más adelante). El símbolo $\langle \quad \rangle$ describe una variable promediada.

$$\langle A \rangle_{Tiempo} = \langle A \rangle_{Ensamble} \quad (1)$$

En la teoría de ensambles termodinámicos, cada propiedad macroscópica está conectada directamente a una función de las coordenadas y momento lineal de las partículas que conforman el sistema. Para una simulación de DM se tiene entonces:

$$\langle A \rangle_{Tiempo} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(p, r) \quad (2)$$

donde N es el número de partículas, $p = \{p_{\alpha}^i\}$ y $r = \{r_{\alpha}^i\}$ son el conjunto de los momentos lineales y el conjunto de los vectores de posición de todas las partículas en el sistema respectivamente, $p_{\alpha}^i = m_{\alpha} v_{\alpha}^i$ es el momento lineal de la partícula α , m_{α} y v_{α} son la masa y velocidad del átomo α respectivamente.

2.2.1 Ensambls termodinámicos

La temperatura o la presión de un sistema se pueden estimar a partir de las posiciones y velocidades de los átomos que conforman dicho sistema gracias al concepto de ensamble introducido por Gibbs. Un ensamble es una colección de sistemas descritos por el mismo conjunto de interacciones microscópicas que comparten un mismo conjunto de propiedades macroscópicas (e.g. la misma energía total, volumen o número de moles) [67]. Entre los diferentes ensambles, se encuentran: el microcanónico, también conocido como ensamble NVE , lo cual significa que el número de partículas N , el volumen del sistema V y la energía total del sistema se mantienen constantes, este ensamble considera un sistema aislado. El ensamble isotérmico-isobárico (NPT), considera sistemas número de partículas, presión y temperatura constantes. El ensamble canónico (NVT), en el cual el sistema es cerrado, con número de partículas, volumen y temperatura constante y el ensamble macrocanónico (μVT), en el cual se considera que el sistema es abierto. En el presente estudio se desea un sistema que se acerque más a la realidad, razón por la cual, las simulaciones se desarrollan con un ensamble NPT .

2.3 Dinámica molecular

La dinámica molecular es un método basado en simulaciones moleculares que permite determinar el movimiento de cada átomo α a través de sus posiciones $r_{\alpha}^i(\tau)$, velocidades $\dot{r}_{\alpha}^i(\tau)$ y aceleraciones $\ddot{r}_{\alpha}^i(\tau)$, donde τ es la variable temporal (ver figura 1). Esta técnica (DM) considera los átomos como partículas, razón por la cual, se puede solucionar numéricamente las ecuaciones de movimiento planteadas por Newton para todas las partículas de un sistema clásico de muchos cuerpos.

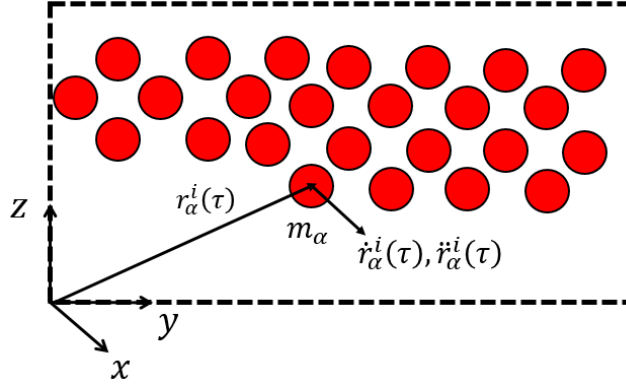


Fig. 1. Representación esquemática del sistema atómico con partículas.

El esquema de integración de las ecuaciones de Newton y la selección del paso de tiempo son definidos de tal forma que se cumpla la conservación de la energía implícita en las ecuaciones de Newton. La energía total o el Halmitoniano (H) de un sistema es:

$$H = K + U \quad (3)$$

donde K es la energía cinética del sistema y U la energía potencial. K es función de la energía cinética de todos los N átomos que conforman el sistema.

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} (\dot{r}_{\alpha}^i)^2 \quad (4)$$

Se puede observar que la energía cinética depende solamente de las velocidades o momento lineal de los átomos. La energía potencial es la suma de la energía potencial de todas las partículas:

$$U = \sum_{\alpha=1}^N U_{\alpha}(r) \quad (5)$$

En este punto es importante notar que la energía potencial de cada átomo U_{α} es función solamente de su vector de posición y de los vectores de posiciones de todas las partículas que están en el sistema, estos últimos expresados como $r = \{r_{\alpha}^i\}$.

2.3.1 Cálculo de posiciones y velocidades de los átomos.

Las etapas que se realizan en las simulaciones atómicas implementando DM, para obtener en cada paso de tiempo la actualización de las posiciones y velocidades de las partículas del sistema se pueden resumir en los siguientes pasos:

Paso 1. Estimación de la fuerza sobre cada átomo. Inicialmente cada átomo tiene una posición y velocidad especificada en el sistema atómico. La posición depende del arreglo de la estructura cristalina, para el caso de los metales. Debido a que se conocen las posiciones de las partículas, se puede calcular la fuerza en cada átomo mediante el gradiente de la energía potencial entre átomos (U), el cual depende solamente de la distancia relativa entre átomos:

$$F_{\alpha}^i = - \frac{\partial U(r)}{\partial r_{\alpha\beta}^i} \quad (6)$$

Donde F_{α}^i es la i -ésima componente del vector de fuerza resultante en el átomo α , $r_{\alpha\beta}^i$ es el vector de posiciones relativa entre el átomo α y sus vecinos β .

Paso 2. Estimación de las velocidades de los átomos. Aplicando la definición de la segunda ley de Newton, $F_{\alpha}^i = m_{\alpha}\ddot{r}_{\alpha}^i$ se puede reescribir la ecuación como:

$$m_{\alpha} \frac{d^2 r_{\alpha}^i}{d\tau^2} = - \frac{\partial U(r)}{\partial r_{\alpha\beta}^i} \quad (7)$$

A partir del gradiente de la energía potencial y considerando que la fuerza es constante en un paso de tiempo, el cambio en la velocidad de cada átomo se toma esencialmente como el producto entre la aceleración de cada átomo y el paso de tiempo implementado en la simulación. Después de que todas las velocidades de los átomos han sido calculadas se implementa un termostato para escalar las velocidades y garantizar que la energía total (en caso de que el ensamble sea NVE) o la temperatura (en caso de que el ensamble sea NPT) del sistema se mantenga constante. Generalmente el termostato implementado en sistemas atomísticos es el de Nose-Hoover, el cual es un algoritmo determinista para mantener la temperatura alrededor del valor establecido previamente en la simulaciones de DM [68,69].

Paso 3. Actualización de los vectores de posición de los átomos. Una vez estimada la fuerza sobre cada átomo y escaladas las velocidades usando el termostato, los vectores de posición (r_{α}^i) de cada átomo α pueden ser estimados a partir de algoritmos de integración de Leap-Frog o Verlet, debido a la segunda ley de Newton.

$$F_{\alpha}^i = m_{\alpha} \frac{d^2 r_{\alpha}^i}{d\tau^2} \quad (8)$$

Paso 4. Proceso iterativo. Una vez actualizado los vectores de posición, estos se convierten en los datos de entrada para repetir el paso 1 nuevamente hasta el paso 3. Mientras más átomos tenga el sistema de la simulación el costo computacional se incrementará.

2.3.2 Lista de átomos vecinos y cutoff

Existen estrategias para reducir los costos computacionales en las simulaciones de DM, tal como se presentó en la sección anterior, el cálculo de la fuerza implica que se deben visitar todos los átomos del sistema para calcular el aporte de cada átomo del sistema en la fuerza resultante sobre un átomo. Para reducir esta cantidad de cálculos se implementa la estrategia de realizar una lista de vecinos basado en una distancia de corte (cutoff). La distancia de corte considera un radio de distancia, en el cual los átomos comprendidos en esta región aportan una fuerza significativa sobre la fuerza resultante en el átomo de estudio. Los átomos dentro del cutoff conformarán la lista de vecinos. Lo primero que se hace en la simulación antes de realizar el cálculo de fuerzas, es identificar la lista de los vecinos más cercanos para cada átomo, para posteriormente ejecutar los pasos mencionados en el proceso de simulación de DM.

2.3.3 Algoritmos de integración usados en DM

La función que deben cumplir los métodos de integración es generar nuevas coordenadas (r_α^i) y velocidades (\dot{r}_α^i) de los átomos a partir de los valores actuales, es decir:

$$r_\alpha^i(\tau_0) \rightarrow r_\alpha^i(\tau_0 + \Delta\tau) \rightarrow r_\alpha^i(\tau_0 + 2\Delta\tau) \rightarrow r_\alpha^i(\tau_0 + 3\Delta\tau) \rightarrow r_\alpha^i(\tau_0 + 4\Delta\tau) \dots \quad (9)$$

y

$$\dot{r}_\alpha^i(\tau_0) \rightarrow \dot{r}_\alpha^i(\tau_0 + \Delta\tau) \rightarrow \dot{r}_\alpha^i(\tau_0 + 2\Delta\tau) \rightarrow \dot{r}_\alpha^i(\tau_0 + 3\Delta\tau) \rightarrow \dot{r}_\alpha^i(\tau_0 + 4\Delta\tau) \dots \quad (10)$$

Los métodos de integración más implementados en las simulaciones de DM, se relacionan a continuación.

Algoritmo de Leap-Frog

Las posiciones de las partículas en la simulación son actualizadas como:

$$r_\alpha^i(\tau + \Delta\tau) = r_\alpha^i(\tau) + \dot{r}_\alpha^i\left(\tau + \frac{1}{2}\Delta\tau\right)\Delta\tau \quad (11)$$

y

$$\dot{r}_\alpha^i\left(\tau + \frac{1}{2}\Delta\tau\right) = \dot{r}_\alpha^i\left(\tau - \frac{1}{2}\Delta\tau\right) + \ddot{r}_\alpha^i(\tau)\Delta\tau \quad (12)$$

Algoritmo de velocidades de Verlet

En este algoritmo las posiciones son actualizadas de la forma:

$$r_\alpha^i(\tau + \Delta\tau) = r_\alpha^i(\tau) + \dot{r}_\alpha^i(\tau)\Delta\tau + \frac{1}{2}\ddot{r}_\alpha^i(\tau)\Delta\tau^2 \quad (13)$$

donde

$$\dot{r}_\alpha^i(\tau + \Delta\tau) = \dot{r}_\alpha^i(\tau) + \frac{1}{2}(\ddot{r}_\alpha^i(\tau) + \ddot{r}_\alpha^i(\tau + \Delta\tau))\Delta\tau \quad (14)$$

Una vez integradas las ecuaciones presentadas (correspondientes a la mecánica de Newton) en esta sección, el ensamble termodinámico será el *NVE*. Modificando las ecuaciones de movimiento se pueden obtener diferentes ensambles termodinámicos. Para el caso del *NPT*, se debe seleccionar un termostato y un baróstato, para garantizar que la presión y temperatura sean constantes durante la simulación [70].

2.3.4 Condiciones de frontera periódicas

El concepto de fronteras periódicas es ampliamente usado en simulaciones de DM y es utilizado para estudiar propiedades en volumen (bulk), lo cual significa que no hay superficies libres en las direcciones que se aplican estas condiciones. La figura 2 presenta el caso en 2D, donde los átomos de la configuración original de trabajo son los que se encuentran dentro de la caja punteada; las condiciones de frontera periódicas consisten en hacer réplicas de la configuración original de trabajo. En cada caja de réplica, los átomos se mueven exactamente igual que los átomos de la caja original.

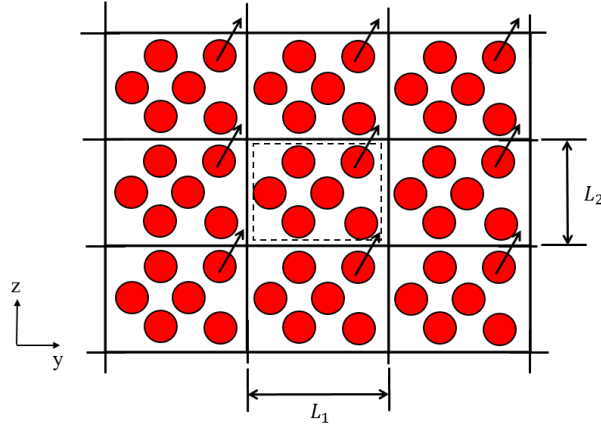


Fig. 2. Esquema de sistema de partículas con condiciones de frontera periódicas.

Con la finalidad de entender las posiciones de las partículas en las réplicas, inicialmente se debe considerar que cada partícula en la caja de simulación (línea punteada) está interactuando con las partículas dentro de la misma caja y con las partículas cercanas que se encuentran dentro de las cajas de réplicas. Las posiciones de los átomos que se mueven fuera de la caja principal (en las réplicas) están dadas por:

$$\vec{r}_i^{rep} = \vec{r}_i + e\vec{L}_1 + q\vec{L}_2 \quad (15)$$

donde \vec{L}_1 y \vec{L}_2 son vectores que corresponden a los bordes de la caja de simulación, e y q son cualquier entero que va desde $-\infty$ a ∞ . En los sistemas estudiados, se verificó que la cantidad de partículas en la caja de simulación era suficiente para representar los fenómenos de propagación de fisuras al compararlo con los resultados obtenidos en otros estudios.

2.3.4 Cálculo de propiedades

A continuación, se mencionan la forma de calcular algunas propiedades de interés en el trabajo actual.

2.3.4.1 Cálculo de la temperatura

La temperatura T se encuentra definida en función de la energía cinética del sistema K , tal como se presenta a continuación:

$$T = \frac{2}{3} \frac{\langle K \rangle}{Nk_B} \quad (16)$$

donde el valor numérico de la constante de Boltzmann es $k_B = 1.3806503 \times 10^{-23} \text{J K}^{-1}$.

2.3.4.2 Cálculo de la presión.

La presión está dada por la ecuación:

$$P = \frac{Nk_B T}{V} - \frac{1}{3V} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1, \beta < \alpha}^N \left\langle r_{\alpha\beta} \frac{dU}{dr_{\alpha\beta}} \right\rangle \quad (17)$$

donde el primer término proviene de la contribución de la energía cinética de las partículas y el segundo término de las fuerzas de interacción entre las partículas α y β en el volumen total del sistema V .

2.3.4.3 Tensor de esfuerzos en sistemas atomísticos.

El concepto de esfuerzo es propio de la teoría de mecánica de medios continuos y es usado en muchos casos para estimar las propiedades mecánicas de los materiales en escala convencional (microscópica y macroscópica). Cuando se calculan cantidades macroscópicas a partir de los resultados de simulaciones atomísticas se está realizando un proceso de modelamiento de fenómenos usando multi-escala. El concepto de tensor de esfuerzos en escala nanométrica es diferente al planteado en la teoría del continuo. El teorema de Virial, usado para estimar el tensor de esfuerzos de un sistema que tiene partículas que interactúan entre sí en un volumen fijo fue propuesto inicialmente por Clausius [71] y Maxwell [72,73]. Esta cantidad es válida para estimar esfuerzos globales en un sistema atomístico y está definida en [74]. Generalmente, es conocido como el tensor de esfuerzo de Virial, este tensor es definido como el negativo del tensor de presiones promedios del sistema, tal como se presenta en la siguiente ecuación.

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= \frac{1}{V} \left(- \sum_{\alpha=1}^N F_{\alpha}^i r_{\alpha}^j - \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} v_{\alpha}^i v_{\alpha}^j \right) \\ &= \frac{1}{V} \left(- \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \frac{\partial U}{\partial r_{\alpha\beta}} \frac{r_{\alpha\beta}^i r_{\alpha\beta}^j}{r_{\alpha\beta}} - \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} v_{\alpha}^i v_{\alpha}^j \right)\end{aligned}\quad (18)$$

donde F_{α}^i es la i -ésima componente de la fuerza sobre el átomo α , r_{α}^j es la j -ésima componente del vector de posición del átomo α . Los términos $v_{\alpha}^i, v_{\alpha}^j$ son la i -ésima y la j -ésima componente del vector de velocidades del átomo α respectivamente, $r_{\alpha\beta}^i, r_{\alpha\beta}^j$ son la i -ésima y la j -ésima componente del vector de posiciones relativas entre los átomos α y β . La primera parte de la ecuación del tensor de esfuerzos de Virial hace referencia al aporte configuracional y el segundo a la contribución de la energía cinética de las partículas que conforman el sistema. Sin embargo, esta cantidad es promediada en el espacio y tiempo, por lo que es inapropiada para estimar esfuerzos locales (en cada partícula). En la presente investigación se hace una estimación del tensor de esfuerzos de Cauchy local basado en el método propuesto por Hardy para estimar propiedades locales a partir de los resultados de simulaciones atomísticas [57]. El detalle del proceso realizado se encuentra en el capítulo 4.

2.4 Potencial interatómico en aluminio

En las simulaciones moleculares el potencial interatómico determina el comportamiento energético del sistema, en función de la distancia relativa entre los átomos. La selección del potencial adecuado depende de las características de los materiales. De forma general, los potenciales interatómicos pueden ser clasificados de la siguiente forma.

2.4.1 Potencial de pares

Esta es la descripción más sencilla de la energía potencial entre átomos, debido a que U depende solo de la distancia entre dos partículas. La energía potencial de un sistema está dada por:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta=\alpha+1}^N \varphi(r_{\alpha\beta}) \quad (19)$$

donde φ es la energía potencial del enlace entre los átomos α y β . El valor de $\frac{1}{2}$ es debido a que la sumatoria de la energía potencial de enlaces considera la interacción de cada átomo con todos los átomos dentro de un volumen representativo limitado por un radio de corte conocido como r_{cutoff} . En la figura 3 se explica gráficamente la situación mencionada.

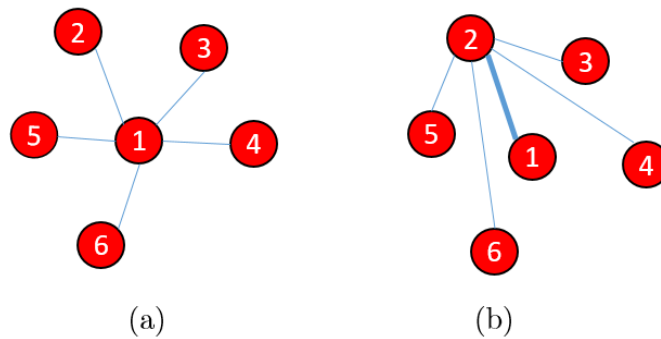


Fig. 3. (a) Interacciones del átomo uno y (b) del átomo con cinco átomos cercanos en un r_{cutoff} .

Los potenciales interatómicos son funciones matemáticas que describen la energía potencial de un par de átomos en función de la distancia relativa entre los átomos, en la siguiente figura se presenta uno de los posibles esquemas de φ .

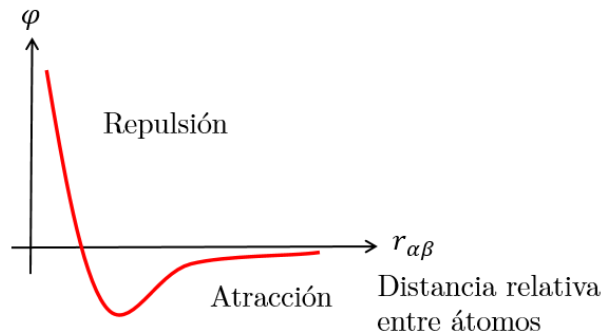


Fig. 4. Comportamiento típico de φ en función de la distancia relativa entre átomos para metales.

Uno de los potenciales de pares más usado es el potencial de Lennard-Jones (LJ-12)[75]. A continuación, se presenta la función matemática de este potencial.

$$\varphi = 4\epsilon \left[\left(\frac{\eta}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left(\frac{\eta}{r_{\alpha\beta}} \right)^6 \right] \quad (20)$$

donde ϵ es la profundidad del potencial y η en esta ecuación hace referencia a la distancia entre los átomos donde $\varphi = 0$.

2.4.2 Campos de fuerzas para materiales biológicos y polímeros

Estos potenciales describen las interacciones entre átomos basados en una combinación de términos energéticos. Un ejemplo es el potencial de CHARMM, el cual es usado en proteínas y biofísica [70].

$$U = U_{bond} + U_{angle} + U_{torsion} + U_{Coulomb} + U_{vdW} \quad (21)$$

2.4.3 Método del átomo embebido (EAM) para metales

Estos potenciales consideran el entorno de un átomo, es decir, los átomos cercanos al átomo del cual se desea estimar su resistencia de enlace. La ecuación que gobierna estos potenciales es de la siguiente forma:

$$U = \sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta=\alpha+1}^N \varphi(r_{\alpha\beta}) + \sum_{\alpha=1}^N \Phi(\rho_{\alpha}) \quad (22)$$

donde Φ es la función de embebimiento y ρ_{α} es la contribución del átomo α a la densidad local de electrones:

$$\rho_{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \psi_{\beta}(r_{\alpha\beta}) \quad (23)$$

aquí ψ_{β} es la contribución de los átomos β a la densidad electrónica del átomo α . Este tipo de potencial considera que la energía del enlace entre dos átomos depende de la distancia entre los dos átomos y de las posiciones de los átomos vecinos, esta suposición corrige la falencia del potencial de pares en los átomos cercanos a la superficie de cristales, debido a que estos cambian su energía a pesar de tener la misma distancia entre ellos, este efecto se puede ver en la figura 5.

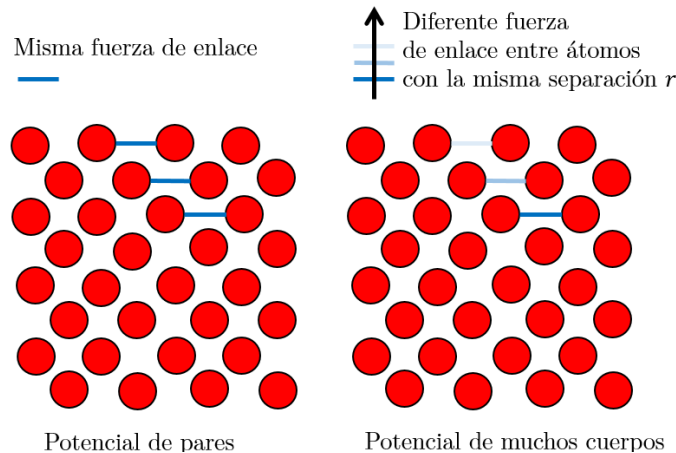


Fig. 5. Diferencia en las propiedades de los enlaces entre átomos cercanos a superficies libre.

2.5 Selección del potencial interatómico

En la presente investigación se estudia la influencia de defectos estructurales presentes en el material de estudio (aluminio). El potencial EAM es el más adecuado para simular el proceso de propagación de fisuras en este tipo de materiales NC [47,76–78]; además, dada la naturaleza del aluminio y el fenómeno de propagación de fisuras, el potencial a utilizar es el EAM obtenido por Mendeleev et al. [77], el cual ya ha sido utilizado para simulaciones asociadas a la propagación de fisuras en bicristales de aluminio [29,79]. A continuación, se presentan las ecuaciones analíticas del potencial interatómico propuesto por Mendeleev et al.

Tabla 1. Funciones del potencial interatómico propuesto por Mendeleev et al [77].

| Función | Valor | Cutoffs |
|--------------|---|--|
| $\varphi(r)$ | $\exp(0.65196946237834 + 7.6046051582736 \cdot r -$ $5.8187505542843 \cdot r^2 + 1.0326940511805 \cdot r^3)$ $+ 13.695567100510(3.2 - r)^4$ $-44.514029786506(3.2 - r)^5$ $+95.853674731436(3.2 - r)^6$ $-83.744769235189(3.2 - r)^7$ $+29.906639687889(3.2 - r)^8$ $-2.3612121457801(4.8 - r)^4$ $+2.5279092055084(4.8 - r)^5$ $- 3.3656803584012(4.8 - r)^6$ $+ 0.94831589893263(4.8 - r)^7$ $-0.20965407907747(4.8 - r)^8$ $+0.24809459274509(6.5 - r)^4$ $-0.54072248340384(6.5 - r)^5$ $+0.46579408228733(6.5 - r)^6$ $-0.18481649031556(6.5 - r)^7$ $+0.028257788274378(6.5 - r)^8$ | 1.5 – 2.3 2.3 – 3.2 2.3 – 3.2 2.3 – 3.2 2.3 – 3.2 2.3 – 3.2 2.3 – 4.8 2.3 – 4.8 2.3 – 4.8 2.3 – 4.8 2.3 – 4.8 2.3 – 6.5 2.3 – 6.5 2.3 – 6.5 2.3 – 6.5 2.3 – 6.5 |
| $\psi(r)$ | $0.00019850823042883(2.5 - r)^4$ $+ 0.10046665347629(2.6 - r)^4$ $+0.10054338881951(2.7 - r)^4$ $+0.099104582963213(2.8 - r)^4$ $+0.090086286376778(3.0 - r)^4$ $+0.0073022698419468(3.4 - r)^4$ $+0.014583614223199(4.2 - r)^4$ $-0.0010327381407070(4.8 - r)^4$ $+0.0073219994475288(5.6 - r)^4$ $+0.0095726042919017(6.5 - r)^4$ | 0 – 2.5 0 – 2.6 0 – 2.7 0 – 2.8 0 – 3.0 0 – 3.4 0 – 4.2 0 – 4.8 0 – 5.6 0 – 6.5 |
| $\Phi(\rho)$ | $-\rho_\alpha^{1/2}$ | 0 – ∞ |

Capítulo 3

Construcción y ejecución de experimentos computacionales

3.1 Introducción

Los sistemas atomísticos deben ser construidos de tal forma que la cantidad de partículas que conforman el sistema sean suficientes para describir correctamente el fenómeno que se está estudiando. En esta investigación se construyó un sistema para estudiar la propagación de nanofisuras con un número de partículas que ha demostrado, en investigaciones anteriores, ser suficiente para describir el fenómeno de estudio correctamente en monocristales y bicristales [12,28,29]. Estos sistemas contaron con ca. 194,000 partículas. Adicionalmente, para las pruebas iniciales del cálculo de esfuerzos locales usando el método de Hardy (el cual requiere un alto costo computacional), se construyó otro sistema de ca. 16,000 partículas con dimensiones $20a \times 20a \times 10a$, donde el parámetro de red para el aluminio es $a = 4.05 \text{ \AA}$, estas dimensiones se tomaron considerando que Zimmerman [80] realizó un estudio similar, donde implementó la misma teoría de Hardy para un material con estructura FCC y trabajó un sistema con dimensiones $20a \times 20a \times 3a$. Después de verificado los códigos para estimar los esfuerzos locales en los sistemas pequeños, se continuó con el cálculo de los esfuerzos locales en los monocristales y bicristales con ca. 195,000 partículas. En este capítulo inicialmente se presenta la metodología para construir los monocristales y bicristales de aluminio, seguido del protocolo de simulación para las pruebas mecánicas de deformación. Después, se presentan los resultados del ensayo de tensión uniaxial, acompañado de un análisis de las dislocaciones presentes para el sistema con ca. 194,000 partículas, donde se logra observar que las fronteras de grano actúan como una barrera a la propagación de la fisura y que una vez que la fisura llega a la frontera de grano se inicia un comportamiento de fractura dúctil.

3.2 Construcción de las geometrías

La representación física de los metales en escala nanométrica se hace a partir de su estructura cristalina, para el aluminio se utiliza la estructura cristalina cubica centrada en las caras (FCC por sus siglas en ingles). En el caso de la mecánica cuántica se utiliza la estructura electrónica, en los campos de fases se utiliza una representación de las fases y en el continuo se consideran los materiales como sólidos sin imperfecciones. En la figura 6 se ilustra un esquema con los tamaños y tiempos que se usan en cada escala, para una mejor comprensión.

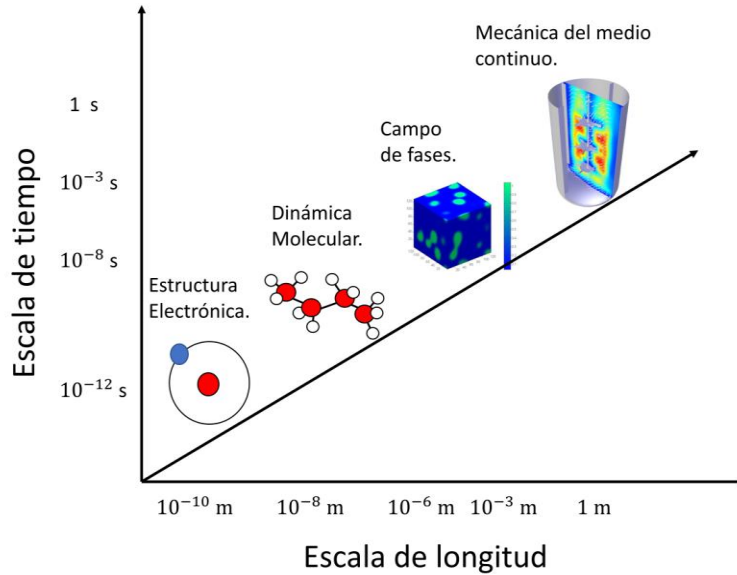


Fig. 6. Representación física de materiales a diferentes escalas.

La representación del aluminio utilizado en la presente investigación, se llevó a cabo a partir de la generación de réplicas de celdas FCC en las direcciones $[1\ 0\ 0][0\ 1\ 0][0\ 0\ 1]$ para el monocristal y el primer cristal de los bicristales de aluminio. Para esto, se desarrolló un código en Matlab© en el cual se debe definir el número de celdas a replicar en cada dirección.

3.3 Etapas de la simulación del ensayo de tensión uniaxial

Todas las simulaciones del ensayo de tensión uniaxial con deformación controlada, fueron realizadas en el presente usando una velocidad de deformación constante de 1×10^{-4} /ps y un paso de tiempo de 0.001 ps bajo el siguiente protocolo.

Etapa 1. Equilibrio Inicial. En esta etapa se desarrolló un algoritmo para minimizar la energía del sistema usando el método del gradiente conjugado, con las siguientes condiciones: tolerancia mínima de 1×10^{-15} y máximo número de iteraciones de 10,000. En la primera parte de este algoritmo se otorgan valores de velocidad a los átomos para generar una temperatura de 300 K y se re-escalán estas en 10,000 pasos. Posteriormente se utiliza el ensamble isotérmico-isobárico NPT para equilibrar el sistema a 300 K y una presión de 1.01 bares en 20,000 pasos de tiempo.

Etapa 2. Proceso de deformación. El sistema se deforma 0.01% de su longitud inicial a una velocidad constante de deformación usando 10,000 pasos de tiempo.

Etapa 3. Proceso de equilibrio. En esta etapa el sistema fue equilibrado a la temperatura y presión seleccionados mediante el ensamble NPT en 20,000 pasos de tiempo. Adicionalmente, la longitud del sistema se mantuvo fija en la dirección de deformación del sistema.

Etapa 4. Las etapas 2 y 3 se repiten hasta la fractura final de los cristales. Las posiciones y velocidades de los átomos en las etapas de equilibrio y deformación fueron actualizadas en cada

paso de tiempo implementando un termostato de tipo Nosé-Hoover [68,69]. El código para las simulaciones del ensayo fue desarrollado y ejecutado en LAMMPS [81].

3.4 Modelación preliminar para validar el cálculo de esfuerzos en el monocristal.

Debido al alto costo computacional requerido para calcular los esfuerzos locales de un sistema de partículas (procedimiento detallado en el capítulo 4), inicialmente se ensayaron sistemas con pocas partículas, para validar que el esfuerzo local calculado era correcto. El sistema seleccionado para realizar los ensayos de tensión uniaxial fue un monocristal simple con ca. 16,000 partículas, considerando que Zimmerman [80] utilizó un sistema con menos partículas (ca. 5,000 partículas) para estimar la integral J usando el método de Hardy para estimar los esfuerzos locales en un material FCC.

Se construyeron en total siete especímenes, uno de ellos sin fisura inicial y los otros seis con una fisura inicial de $l_0 = 4a, 5a, 6a, 7a, 8a, 9a$ unidades de celda. Donde el parámetro de red para el aluminio es $a = 4.05 \text{ \AA}$. Con el espécimen sin defectos iniciales (sin fisura inicial) se verificó que el esfuerzo último de tensión era acorde al orden de magnitud reportado por Tang y Yang [82] para una velocidad de deformación de $1 \times 10^{-4}/\text{ps}$. Para el caso del monocristal sin defecto, se consideraron condiciones de frontera periódicas en todas las direcciones. En el caso de los especímenes con fisura inicial se implementaron condiciones de superficie libre en la dirección x y condiciones de frontera periódicas en las direcciones y, z . Las dimensiones del sistema de partículas fueron $L_x = 20a, L_y = 10a$ y $L_z = 20a$, las cuales se presentan en la figura 7 junto con el monocristal una vez pasado la etapa de equilibrio.

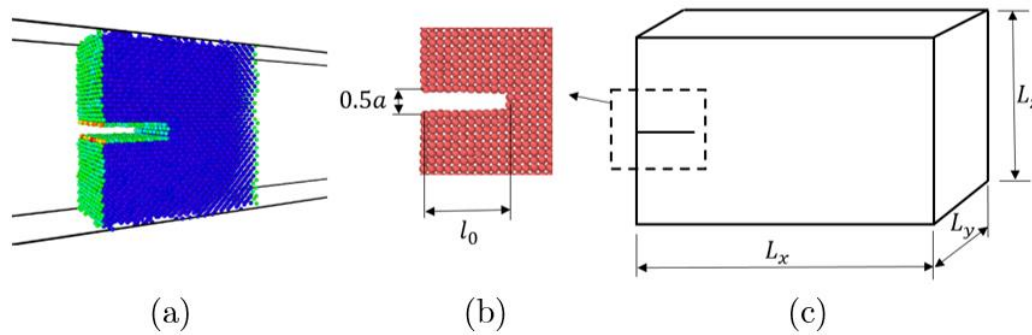


Fig. 7. (a) Monocristal fisurado después del equilibrio; (b) esquema con dimensiones de nano-fisura y (c) sistema atomístico.

3.5 Modelación del monocristal y bicristal

Los bicristales se diferencian de los monocristales, por tener una frontera de grano entre dos cristales con orientación diferente. Es decir, el bicristal está conformado por dos granos o cristales. El primer cristal se construye de igual forma que un monocristal (réplicas de la celda FCC en las direcciones $[1\ 0\ 0][0\ 1\ 0][0\ 0\ 1]$) y el segundo cristal se construye a partir de una matriz de rotación para generar los vectores de posición de las partículas que conforman el segundo grano en la orientación deseada. Existen varios tipos de fronteras de grano y son clasificados de acuerdo a su orientación, los dos comúnmente estudiados son: frontera de grano inclinada, la cual se puede

definir como $\theta \langle 1\ 0\ 0 \rangle$ y frontera de grano rotada que se puede definir como $\zeta \langle 0\ 1\ 0 \rangle$. En la figura 8 se presenta un esquema para comprender mejor el concepto de la orientación en el segundo grano acorde al tipo de frontera de grano presente.

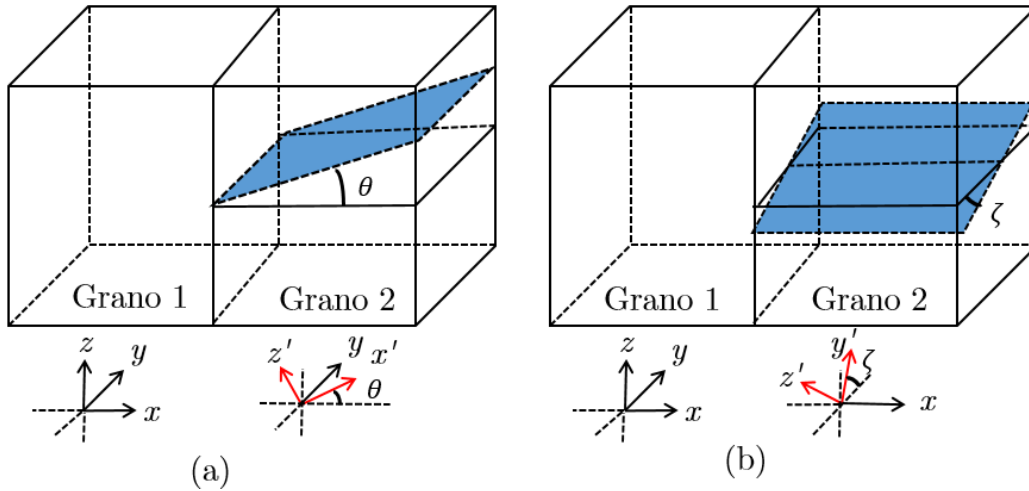


Fig. 8. (a) Inclinación del arreglo del grano 2 para GB inclinada y (b) rotación del grano 2 en GB rotada.

Igualmente, puede presentarse una frontera de grano tipo mixta, la cual se presenta cuando se varían los ángulos θ, ζ del grano 2 respecto al grano 1 para el mismo sistema atómico. El caso de estudio en la presente investigación consiste en un bicristal con ángulo de inclinación $\theta = 30^\circ$, fisura inicial l_0 y dimensiones de caja de simulación en función del parámetro de red, tal como se presenta en la figura 9.

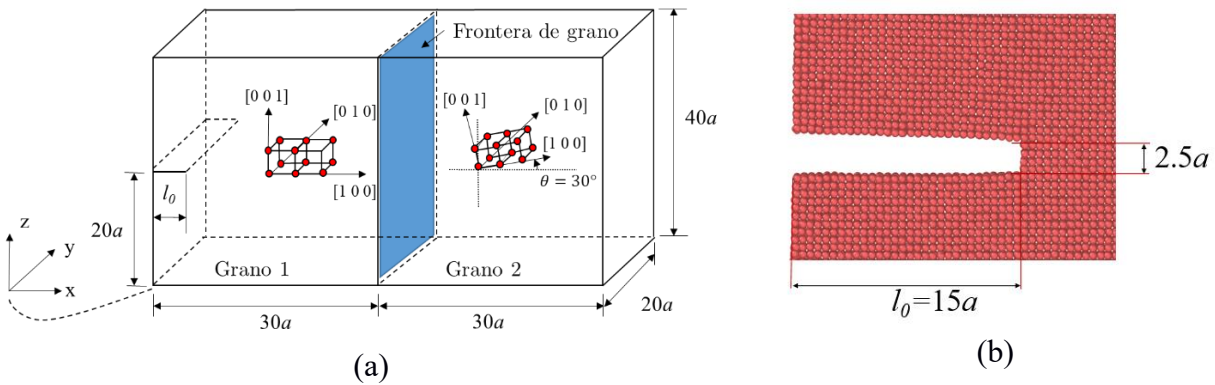


Fig. 9. (a) Configuración del bicristal y (b) dimensiones de la fisura para $l_0 = 15a$.

Para el sistema del monocristal, con ca. 195,000 partículas, se implementaron las mismas dimensiones $[1\ 0\ 0][0\ 1\ 0][0\ 0\ 1]$, es decir no se rotaron las posiciones de las partículas del sistema. Para visualizar las dislocaciones y el parámetro de centro-simetría, el cual es definido en [83], se implementó el análisis de dislocaciones DXA [84] en OVITO [85]. El parámetro de centro-simetría es importante debido a que puede ser usado para evidenciar cuando un átomo hace parte de una red perfecta, de un defecto local o de una superficie. En la figura 10 se presenta un bicristal sin imperfecciones y con la GB definida después de la etapa de equilibrio.

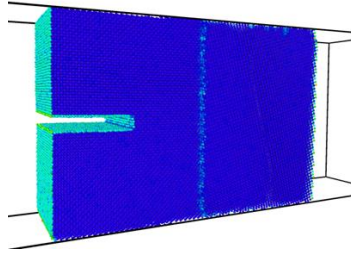


Fig. 10. Bicristal fisurado en equilibrio mostrando la frontera de grano.

Las simulaciones del ensayo de tensión con deformación controlada ejecutadas en LAMMPS se corrieron en estaciones de trabajo de 40 procesadores, 80 procesadores y en una súper computadora con disponibilidad de 600 procesadores. Para el cálculo del volumen de cada átomo se implementaron las teselaciones de Voronoi propuestas originalmente por Georgy Voronoi [86] e implementadas en el algoritmo voro++ [87].

3.6 Resultados de la modelación del ensayo de tensión uniaxial en monocristal y bicristal de aluminio

Las curvas de esfuerzo-deformación para los diferentes ensayos de tensión se construyeron con los resultados de las simulaciones de DM y en los picos de la curva se realizó un análisis de dislocaciones usando DXA en OVITO. Junto con la curva de los bicristales, se presenta la curva del monocristal con el mismo tamaño de fisura inicial l_0 . A continuación, se presentan los casos para los monocristales y los bicristales. La línea roja es el comportamiento del monocristal (SC) y la línea azul el del bicristal (BC).

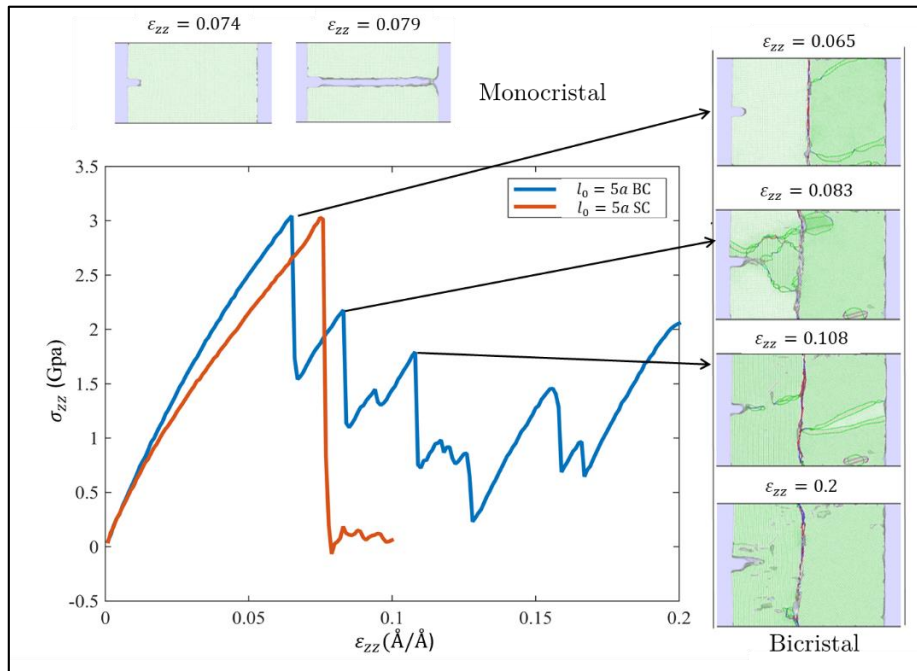


Fig. 11. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para el bicristal con $l_0 = 5a$, parte superior: comportamiento del monocristal y en la derecha: comportamiento del bicristal con el análisis de dislocaciones DXA implementado en OVITO.

Para el caso del monocristal se observa un comportamiento de fractura frágil, debido a la propagación inestable de la fisura. Sin embargo, en el caso del bicristal se puede observar que σ_{zz} cae varias veces. En cada paso de deformación se le realizó un DXA para observar que ocurría en la caída del esfuerzo. la primera caída ocurre en $\varepsilon_{zz} = 0.065$, al realizar el DXA se observa la aparición de dislocaciones (que coinciden con la orientación de los planos de deslizamiento y pueden asociarse con la deformación plástica) en el segundo cristal. Para $\varepsilon_{zz} = 0.083$ se observa la interacción entre dislocaciones generadas desde la punta de la fisura y la la frontera de grano. En $\varepsilon_{zz} = 0.108$ se observa la coalescencia de varias vacancias pequeñas en los dos cristales (proceso típico de la fractura dúctil) y finalmente en $\varepsilon_{zz} = 0.2$ se observa que la coalescencia de vacancias ha formado defectos de mayor tamaño en los dos granos del bicristal (confirmando el comportamiento dúctil del material para este tamaño de l_0).

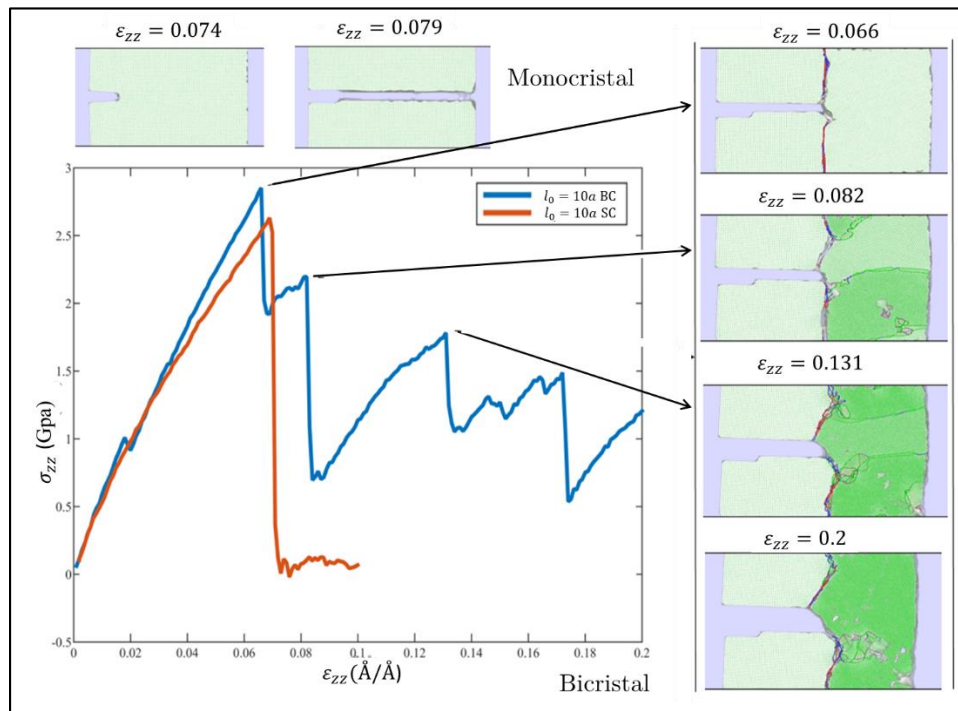


Fig. 12. Curva σ_{zz} vs. ε_{zz} para el bicristal con $l_0 = 10a$, parte superior: comportamiento del monocristal y en la derecha: comportamiento del bicristal con el análisis de dislocaciones DXA implementado en OVITO.

Para el tamaño de fisura inicial $l_0 = 10a$, se observa fractura frágil en el monocristal al igual que a lo largo del grano 1 del bicristal. Se considera comportamiento frágil en el primer rasgamiento (propagación de la fisura a través del grano 1 y posterior detención de la propagación, inestable, al alcanzar la frontera de grano) debido a la ausencia de dislocaciones en los dos cristales antes y justo después de detenerse la propagación de la fisura al alcanzar la frontera de grano, tal como se observa para $\varepsilon_{zz} = 0.066$. Para producir la fractura del grano 2 se debió continuar la modelación con el respectivo aumento progresivo de la deformación en la dirección z; para los siguientes valores de deformación se observa el típico comportamiento de fractura dúctil, es decir: nucleación de vacancias, coalescencia y crecimiento de vacancias. Para $l_0 = 15a, 20a$ el comportamiento es similar al observado para $l_0 = 10a$, tal como se observa en las figuras 13 y 14.

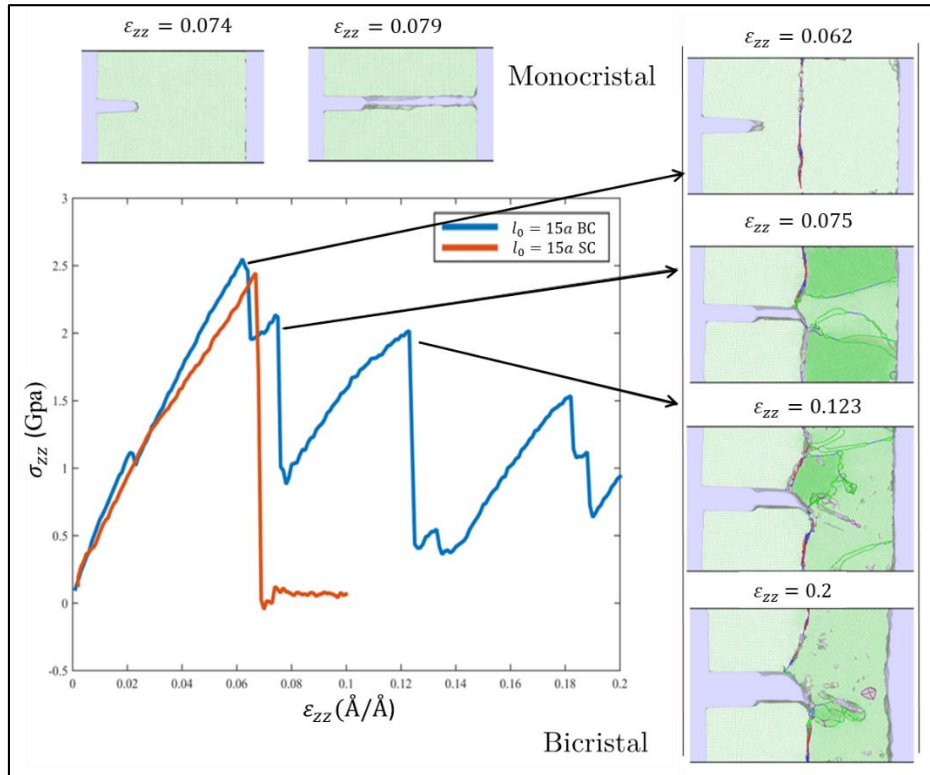


Fig. 13. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para bicristal con $l_0 = 15a$. Parte superior: comportamiento del monocristal y la derecha: bicristal con DXA implementado en OVITO.

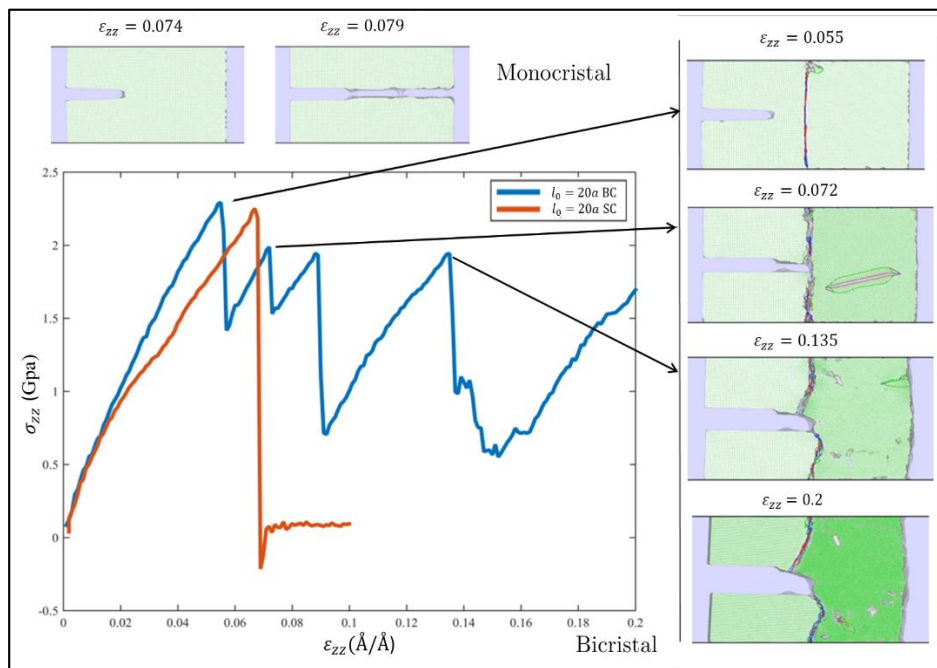


Fig. 14. Curva σ_{zz} vs. ϵ_{zz} para bicristal con $l_0 = 20a$. Parte superior: presenta comportamiento del monocristal y la derecha: bicristal con DXA implementado en OVITO.

3.7 Discusión

Las curvas esfuerzo-deformación muestran claramente como las caídas en los esfuerzos se deben a la liberación de energía para crear una nueva superficie (monocristal o primer rasgamiento) o energía de deformación plástica (en el bicristal) debido al movimiento de los planos de deslizamientos, estos defectos se representan como dislocaciones mediante el análisis DXA. Para el caso de los monocristales fisurados, las fisuras se propagan de forma inestable sin que exista oportunidad de que se observen dislocaciones, es decir, sin presentación de deformación plástica. Para el caso de $l_0 = 5a$, se observa que antes de la propagación de la fisura a través del grano 1, aparecen dislocaciones generadas desde la punta de la fisura hacia la frontera de grano y en viceversa, es decir, desde la frontera de grano hacia la punta de la fisura. Adicionalmente, se encuentra que el esfuerzo global máximo disminuye a medida que l_0 es mayor. A su vez, se observa que a mayor l_0 aparecen menos dislocaciones en el grano 2 a medida que se deforma el material. Los ensayos en este capítulo se llevaron hasta $\varepsilon_{zz} = 20\%$, con la finalidad de observar el comportamiento mecánico antes y después del primer rasgamiento. En el capítulo 5, se presentan las simulaciones completas hasta la fractura final del bicristal.

3.8 Conclusiones

De los resultados del ensayo de tensión uniaxial con deformación controlada implementando simulaciones DM, se encontraron los siguientes hallazgos:

- Las fronteras de grano son zonas de nucleación de defectos. Estos defectos interactúan con las dislocaciones provenientes de la punta de la fisura produciendo una barrera estructural para la propagación de la misma. Es posible, que la fisura se detiene en la frontera de grano debido al cambio en la orientación de los planos de deslizamiento en el segundo cristal.
- Independiente del tamaño inicial de la fisura si no hay frontera de grano, la propagación es inestable. Se evidencia que la ductilidad experimentada por el material fisurado, proviene de la interacción de las dislocaciones generadas desde los diferentes defectos en la estructura (fronteras de grano y punta de la fisura).
- En ausencia de una frontera de grano la disminución del esfuerzo promedio máximo se debe a la disminución del área efectiva de la probeta.

Capítulo 4

Tensor de esfuerzos local

4.1 Introducción

En las últimas décadas, las simulaciones atomísticas han ayudado a entender el comportamiento de materiales nano-cristalinos [17,22,23,47,70,78,88–90]. Varias investigaciones han logrado calcular medidas del continuo con los resultados de simulaciones de DM. Tal es el caso de Zimmerman et al, [91] que implementaron el método propuesto por Hardy [57], el cual propone cuantificar medidas de la mecánica del medio continuo (tensor de esfuerzos de Cauchy) a partir de los resultados de DM usando funciones de localización. La propuesta de Hardy acabó con los siguientes tres inconvenientes que existían hasta ese momento: (I) La validez de las leyes de conservación para el continuo dependían de un ensamble en particular, (II) la formula obtenida para la parte configuracional del tensor de esfuerzo contiene una suma infinita que debe truncarse, (III) la dificultad en la evaluación de expresiones que contuvieran la función delta de Dirac. Batra y Pacheco también plantearon una función de localización, para determinar el tensor de esfuerzos de Cauchy para un nano-cristal de Au con FCC [17], sin embargo la fuerza interatómica se estima a partir del gradiente del potencial interatómico, el cual cambia de acuerdo al tipo de material y fenómeno de estudio. Para el caso del EAM se deben hacer cálculos con los vecinos para estimar las fuerzas interatómicas y las componentes del tensor [57], lo que hace que sea alto el costo computacional, sin embargo, estas medidas del continuo son relevantes en esta escala, dado que con este tensor de esfuerzos locales se pueden verificar teorías de escala convencional, tal como lo hizo Zimmerman et al, para estimar la integral J en un monocristal de Al [80]. En el presente capítulo, se estima el campo de esfuerzo para un monocristal de Al, usando el método de Hardy, para el potencial EAM de Mendeleev [77]. Inicialmente se trabaja con un sistema de ca. 16,000 átomos, para poder validar los códigos implementados, dado el alto costo computacional y una vez verificado los cálculos del tensor de Cauchy local, se procede a implementar los códigos en los sistemas de ca. 195,000 átomos. La diferencia entre el esfuerzo global y el esfuerzo promedio de los esfuerzos locales del sistema fue menor al 2% para los sistemas con ca. 195,000 átomos.

4.2 Campo de esfuerzos local para nanocristales de aluminio

Usualmente el tensor de esfuerzos de Cauchy ha sido considerado como la parte del tensor de esfuerzos de Virial que corresponde solamente a la energía potencial del sistema. Zimmerman et al. [92] demostraron que al usar el método de Hardy para estimar los esfuerzos locales, la contribución de la energía cinética solo es significativa para sistemas sujetos a una temperatura mayor a un-octavo de la temperatura de fusión, por lo cual queda la siguiente expresión para el tensor de Cauchy:

$$\sigma(r) = -\frac{1}{2V} \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}^i r_{\alpha\beta}^j \quad (24)$$

El método propuesto por Hardy estima las contribuciones de las fuerzas entre átomos al tensor local de Cauchy mediante una función de longitud de enlace entre los átomos. La función de enlace B permite definir coeficientes apropiados para la evaluación de un polinomio cúbico que hace más eficiente el cálculo de la fuerza o la energía del sistema atómico. Al agregar la función de enlace para hacer el cálculo de tensor de esfuerzos locales de Cauchy σ'_{ij} queda la ecuación propuesta por Hardy [57]:

$$\sigma'_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}^i r_{\alpha\beta}^j B(r_\alpha, r_\beta, R) \quad (25)$$

R denota el punto material donde se determinará el esfuerzo y B tiene la forma propuesta por Hardy [57]:

$$B(r_\alpha, r_\beta, R) = \int_0^1 \Psi(\lambda r_{\alpha\beta} + r_\beta - R) d\lambda \quad (26)$$

Esta ecuación representa la fracción del enlace entre los átomos α y β contenida en un volumen representativo de un punto material (ver figura 15), Ψ denota la función de localización o kernel, que se define en la ecuación 27 y λ es la variable de integración de Hardy. Las cantidades de la mecánica del medio continuo que se calculan para el punto material R dependen solamente de las propiedades de los átomos dentro del volumen representativo. El volumen está definido por un radio de dos veces el parámetro de red $a = 4.05 \text{ \AA}$ en el caso del aluminio. Para entender el volumen representativo, se presenta la siguiente figura, en la cual se presentan los átomos a tener en cuenta por su contribución. R es la posición del átomo al que se va a calcular la propiedad, los átomos α son los átomos de la lista de vecinos del átomo con posiciones R y los átomos β son los que conforman la lista de vecinos de los átomos α .

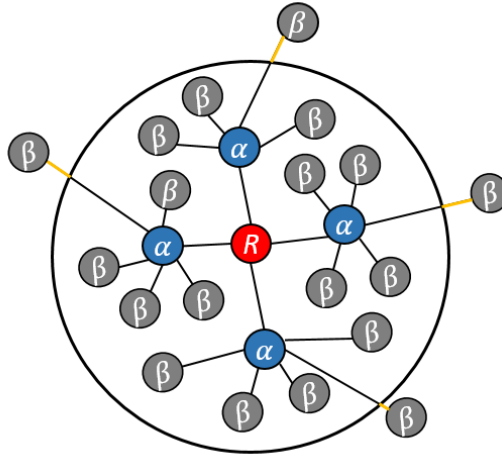


Fig. 15. Esquema del volumen representativo para determinar propiedades locales.

Hardy propone un procedimiento de suavizado, el cual considera que las partículas de un sistema poseen una distancia espacial denominada longitud de suavizado, en la cual se puede implementar una función kernel para suavizar las propiedades de las partículas. Por lo tanto, para cualquier punto material R del sistema se puede obtener una propiedad al sumar todas las contribuciones relevantes de las partículas α, β presentes en el rango de la función kernel. Para cada contribución

de las partículas α, β sobre el punto material R debe ponderarse la distancia entre R y la partícula α o β (esto lo realiza la función kernel). En la presente investigación, debido a que el material tiene estructura cristalina FCC se implementó la función kernel propuesta por Batra y Pacheco [17]:

$$\Psi(R) = \frac{1}{\pi h^3} \begin{cases} \left(1 - \frac{3}{2}s^2 + \frac{3}{4}s^3\right), & s \leq 1, \\ \frac{1}{4}(2-s)^3, & 1 < s \leq 2, \\ 0, & \text{otros valores de } s \end{cases} \quad (27)$$

$$s = \frac{|\lambda r_{\alpha\beta} + r_{\beta} - R|}{h}$$

aquí h es la longitud de suavizado que determina el tamaño del soporte compacto de la función de localización. La longitud de suavizado de la función de localización es $2a$. Para evaluar la integral de la función de enlace, se utilizó la cuadratura de Gauss de 5-puntos [17]. Tal como se mencionó anteriormente, para calcular el tensor de esfuerzos locales se necesita el gradiente del potencial interatómico. Para el caso del potencial EAM, el gradiente es de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} F_{\alpha\beta}^i &= -\vec{\nabla}_{\vec{r}_i} U = -\vec{\nabla}_{\vec{r}_i} U_{\alpha} \\ &= -\sum_{\beta \neq \alpha} \left[\frac{\partial \Phi_{\alpha}(\rho_{\alpha})}{\partial \rho_{\alpha}} \frac{\partial \psi_{\beta}(r_{\alpha\beta})}{\partial r_{\alpha\beta}} + \frac{\partial \Phi_{\beta}(\rho_{\beta})}{\partial \rho_{\beta}} \frac{\partial \psi_{\alpha}(r_{\alpha\beta})}{\partial r_{\alpha\beta}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \varphi_{\alpha\beta}(r_{\alpha\beta})}{\partial r_{\alpha\beta}} \right] \left(\frac{r_{\alpha}^i - r_{\beta}^i}{r_{\alpha\beta}} \right) \end{aligned} \quad (28)$$

Las funciones analíticas de φ, ψ, Φ se tomaron del trabajo de Mendeleev et al. [77]. A partir de las ecuaciones analíticas del potencial de Mendeleev se calculó el gradiente del potencial entre partículas. Debido al costo computacional se desarrolló un código paralelizado en Fortran 90 usando OpenMP.

4.3 Verificación de los esfuerzos locales en monocristal

Para verificar los resultados del campo de esfuerzos locales estimado, usando las proyecciones de Hardy, se calculó el promedio de los esfuerzos calculados de todas las partículas del sistema a una deformación $\varepsilon_{zz} = 8.5\%$ y se comparó con el esfuerzo global obtenido de las simulaciones de DM (esfuerzo de Virial). La figura 16 presenta los esfuerzos promedios, desviación estándar y esfuerzo máximo calculado con las funciones de enlace, para diferentes tamaños iniciales de fisura.

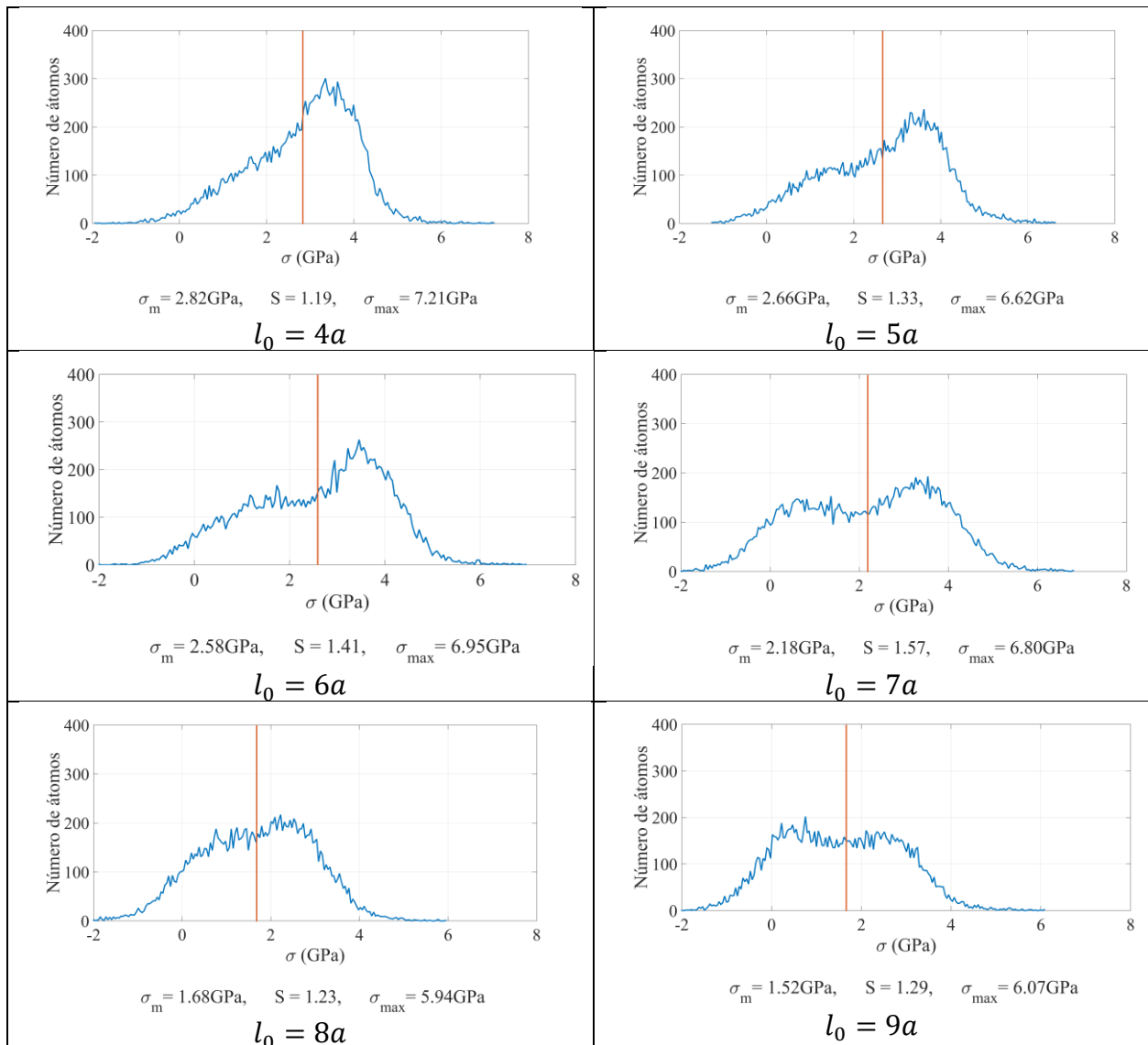


Fig. 16. Análisis del comportamiento de los esfuerzos locales en el monocristal.

La tabla 1 presenta los valores estimados con los resultados de DM (σ_{zz} DM) y los promedios de los calculados con el método de Hardy ($\bar{\sigma}_{zz}$) junto con la diferencia entre estos valores a una deformación unitaria de 8.5%.

Tabla 2. Comparación entre $\bar{\sigma}'_{zz}$ y σ_{zz} DM en monocristal con ca. 16,000 átomos.

| l_0 | σ_{zz} DM | $\bar{\sigma}'_{zz}$ Método de Hardy | Diferencia porcentual (%) |
|-------|------------------|--------------------------------------|---------------------------|
| 4a | 2.93 | 2.82 | 3.75 |
| 5a | 2.79 | 2.66 | 4.66 |
| 6a | 2.7 | 2.58 | 4.44 |
| 7a | 2.45 | 2.18 | 11.02 |
| 8a | 1.86 | 1.68 | 9.67 |
| 9a | 1.69 | 1.52 | 10.05 |

Al revisar la diferencia porcentual se observa que todos los valores están por debajo 11.1%, lo cual es aceptable, considerando el número de cálculos que se deben hacer para poder estimar los esfuerzos locales de un sistema a pesar de que se trabajó con doble precisión. Una vez verificado que el procedimiento es aceptable, se investigó la influencia del tamaño de la fisura en el esfuerzo último del monocristal. La tabla 2 presenta la reducción del esfuerzo global máximo tomando como referencia el $S_U = 6.18$ GPa de un monocristal de aluminio sin defecto.

Tabla 3. Reducción del esfuerzo global máximo en monocristal con ca. 16,000 átomos.

| l_0 | Esfuerzo global máximo DM | % reducción |
|-------|---------------------------|-------------|
| 4a | 3.14 | 49.19 |
| 5a | 2.97 | 51.94 |
| 6a | 2.89 | 53.24 |
| 7a | 2.51 | 59.39 |
| 8a | 2.36 | 61.81 |
| 9a | 2.17 | 64.89 |

Como se puede observar en la tabla 3, la inclusión de una fisura en el monocristal sin defecto reduce de golpe el esfuerzo último a menos del 49% de su resistencia sin defectos. Con la finalidad de observar las variaciones en el campo de esfuerzos locales σ'_{zz} para los monocristales con diferentes tamaños de fisura inicial se graficaron los esfuerzos para cada átomo usando OVITO a una $\varepsilon_{zz} = 8.5\%$. En la figura 17 se puede observar la distribución de los esfuerzos locales para los diferentes tamaños de fisura usando las funciones de Hardy.

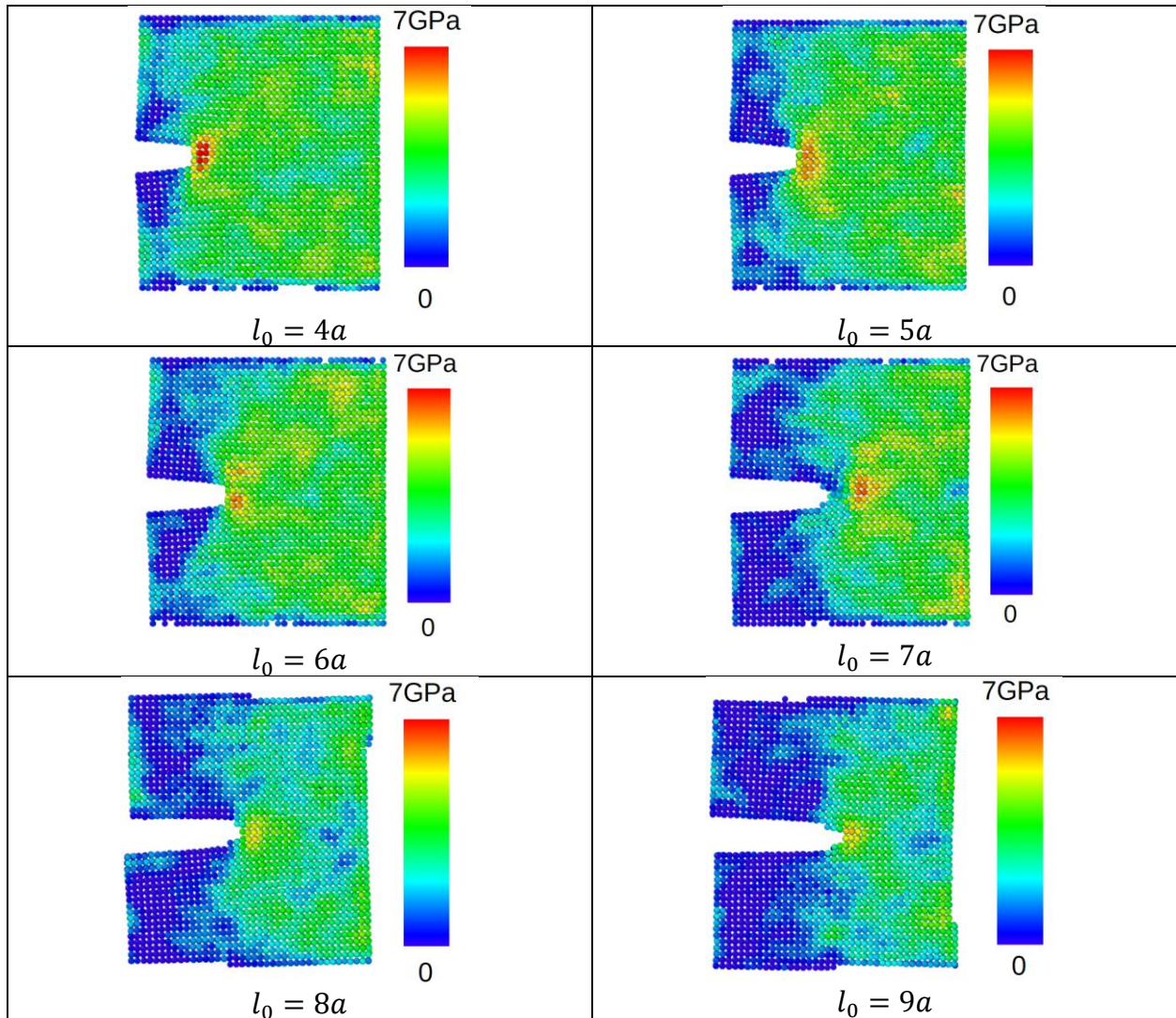


Fig. 17. Campo de esfuerzos σ'_{zz} en monocristales con diferentes l_0 .

Con la aproximación estimada de los esfuerzos locales se puede apreciar como la región con valores de esfuerzos iguales a cero se encuentra en la misma región planteada por Griffith al usar el análisis de esfuerzo de Inglis [93] en su balance de energía para estimar el esfuerzo de falla.

4.4 Resultados de esfuerzos locales en monocristal y bicristal

Para el sistema de ca. 195,000 átomos se observó una diferencia porcentual entre el esfuerzo Virial y el promedio de los locales menor al 2%. Esto significa que mientras más átomos contenga el sistema, mejor será la aproximación, sin embargo, la mayor limitante es el costo computacional. A continuación, se presentan los campos de esfuerzos locales σ'_{zz} para el monocristal y bicristal con $l_0 = 10a$.

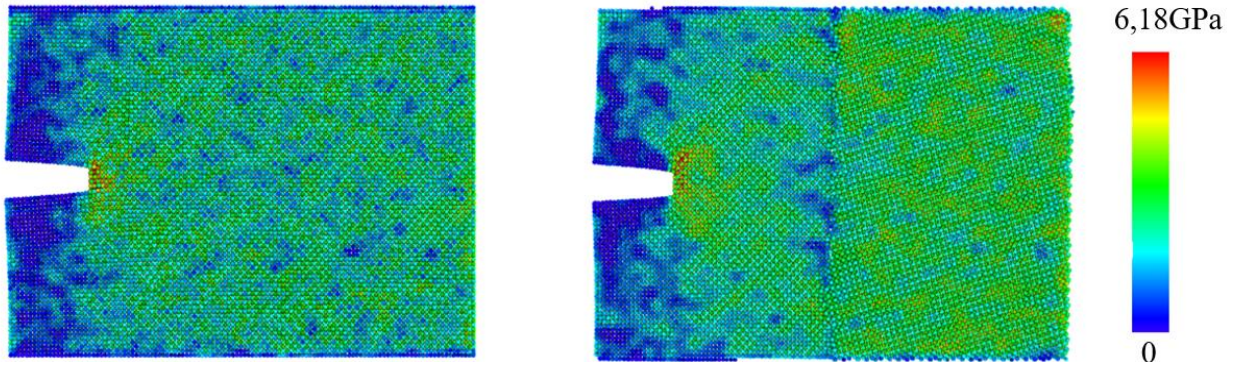


Fig. 18. Campo de esfuerzos σ'_{zz} en la izquierda para el monocristal y en la derecha para el bicristal de aluminio.

4.5 Discusión

El campo de esfuerzos alrededor de la punta de la fisura para $l_0 < 7a$ presentó esfuerzos máximos mayores en aproximadamente 10%, lo cual denota que hay mayor energía en la punta de la fisura para los tamaños de fisuras más pequeños ($l_0 < 7a$), esto se podría relacionar con lo observado en el capítulo 3, en el cual, para un tamaño de fisura pequeño ($l_0 = 5a$), se generan dislocaciones desde la punta de la fisura (ver figura 11) y las dislocaciones son generadas desde los puntos con mayor energía en el sistema.

4.6 Conclusiones

A partir de los campos de esfuerzos calculados para el monocristal se encontraron los siguientes hallazgos:

- Para $l_0 = 4a$ el esfuerzo máximo en la punta de la fisura aumenta en casi un 17% del calculado para $l_0 = 9a$.
- La energía de deformación liberada está relacionada con el tamaño de la fisura inicial y el volumen del material, tal como se puede observar en la figura 17. Donde se considera que el volumen con energía de deformación liberada es donde los esfuerzos son cero.
- El promedio de los esfuerzos locales calculados usando el método de Hardy es acorde al esfuerzo global del sistema. La diferencia fue menor al 2% para sistemas con ca. 195,000 partículas y menor a 12% para sistemas con ca. 16,000 partículas.
- La inclusión de una fisura inicial reduce el esfuerzo máximo a tensión del espécimen en menos de un 49%, como puede observarse en la tabla 3.

Capítulo 5

Mecánica de la fractura

5.1 Introducción

La mecánica de la fractura estudia el comportamiento mecánico de los materiales con fisuras o defectos internos y establece la tenacidad a la fractura como la propiedad con la cual se puede cuantificar la resistencia que tiene un material a fallar por propagación inestable de fisuras [51,53]. La dinámica de defectos estructurales tales como dislocaciones y fronteras de grano en materiales NC determina sus propiedades mecánicas [1-3]. En general estos defectos actúan como barreras oponiéndose a la propagación de fisuras, tal como se observó en el capítulo 3. Actualmente se han realizado múltiples investigaciones usando la técnica de DM para estimar parámetros de mecánica de la fractura para diferentes tipos de nano-materiales [48,49,89,94–100]. La mecánica de la fractura lineal elástica es una de las teorías más implementadas para estimar la falla frágil de los componentes debido a la facilidad y precisión de sus cálculos, sin embargo, cuando el comportamiento del material es muy dúctil, esta teoría pierde validez, por lo que es necesario el uso de la mecánica de la fractura elasto-plástica. Dos de los métodos más usados, dentro de la mecánica de la fractura elasto-plástica, son: el Desplazamiento de la apertura de la punta de la fisura (CTOD por sus siglas en inglés) y la integral J . La aplicabilidad de estos dos métodos, a nivel atómico, han sido estudiada en las últimas décadas basados en simulaciones de DM. En el presente trabajo, con los resultados de las simulaciones de ensayos mecánicos usando el potencial EAM de Mendeleev [77] (capítulo 3) y los tensores de esfuerzo de Cauchy locales para los monocristales y bicristales de aluminio (capítulo 4) se calcularon los parámetros de la mecánica de la fractura. En este capítulo se presenta el procedimiento para calcular el intensificador de esfuerzos K_I , la velocidad de liberación de energía de deformación ERR, el desplazamiento de la apertura de la punta de la fisura CTOD y la integral J a partir de los resultados de las simulaciones de las pruebas mecánicas usando DM. Adicionalmente, se verificaron las consideraciones de Rice para estimar la integral J usando los esfuerzos locales obtenidos en el capítulo 4 y los gradientes de deformación calculados con OVITO.

5.2 Mecánica de la fractura

La propiedad mecánica más importante en elementos fisurados es la tenacidad a la fractura. Esta propiedad mecánica puede ser estimada, en materiales predominantemente lineales elásticos, a partir del intensificador de esfuerzos K_C o en materiales elasto-plásticos por medio de la integral J_C o del Desplazamiento de la apertura de la punta de la fisura CTOD_c. Griffith planteó el primer criterio de ruptura en un material predominantemente lineal elástico: si $K_I > K_C$, la fisura se propaga; Griffith llegó a esta conclusión a través de un balance energético y aplicando parte del trabajo de Inglis [93]. Mientras que Rice planteó la estrategia para obtener otro parámetro para la tenacidad para materiales no lineales J_C [56]. A su vez, Wells también propuso un parámetro basado en la CTOD [54], para medir la tenacidad en materiales dúctiles donde no es posible aplicar

la LEFM. Adicionalmente, Irwing propuso una modificación para poder realizar el cálculo de las zonas plásticas [53,55]. Estas teorías han funcionado bien para estimar propiedades macroscópicas en materiales con tamaño de grano convencional. En el caso de los nanomateriales, se ha evidenciado que existen nuevos efectos que deben ser considerados, como es el caso de las fronteras de grano, cuya fracción volumétrica genera una energía considerable que afecta el valor de las propiedades estimadas. En el presente capítulo, se estiman el intensificador de esfuerzos K_I , la integral J y la CTOD a partir de simulaciones en modo de carga I (ver figura 19). Adicionalmente, se establece una metodología para obtener la tenacidad K_C y J_C .

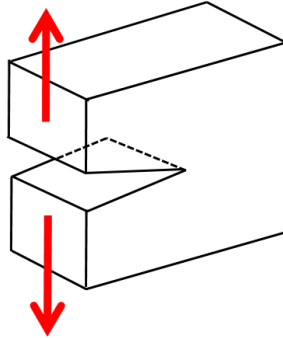


Fig. 19. Modo de carga I.

5.3 Estimación de K_I

K_I es conocido como uno de los parámetros de la LEFM que permite estimar el campo de esfuerzos alrededor de la punta de la fisura en materiales predominantemente elásticos. En la presente investigación, con el fin de tener en cuenta un comportamiento elasto-plástico, el K_I se estimó a partir de: el esfuerzo global máximo, σ_o , la CTOD (parámetro elasto-plástico), el coeficiente de Poisson ν y el módulo de elasticidad E , bajo consideraciones de deformación plana, tal como aparece en [53]:

$$K_I = \sqrt{\frac{\pi}{4} \cdot CTOD \cdot \frac{E}{1 - \nu^2} \cdot \sigma_o} \quad (29)$$

Las propiedades E y ν se obtienen de los resultados de una simulación de un ensayo de tensión uniaxial para un monocristal de aluminio sin defecto (ver figura 20), implementando el mismo procedimiento de desplazamiento controlado con escalones de equilibrio, tal como se presentó en el capítulo 3 en la sección 3.3. La curva esfuerzo-deformación construida a partir del esfuerzo de Virial se presenta en la figura 20.

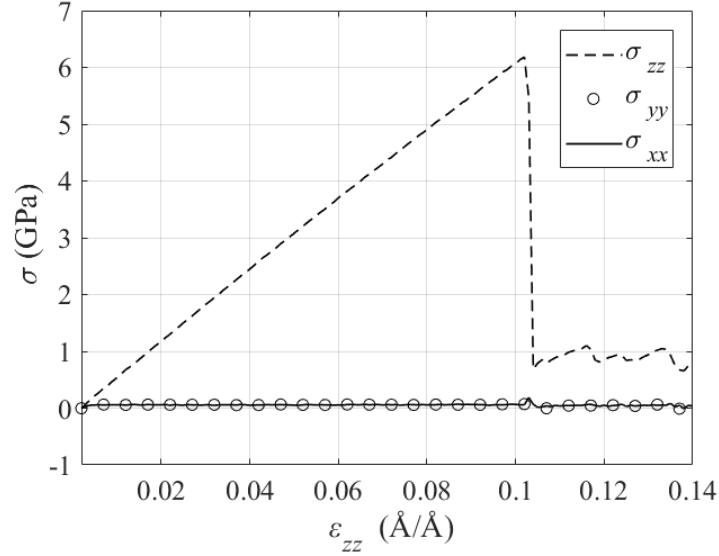


Fig. 20. σ vs. ε_{zz} para un monocristal sin defectos.

Las constantes que se obtuvieron fueron $\nu = 0.36$ y $E = 60.58$ GPa. Este valor de módulo de elasticidad se encontró acorde a los resultados experimentales reportados por Haque y Saif [101]. Con estos resultados, primero, se estimó el K_I necesario para propagar la fisura a través del primer cristal (a este punto se le llama primer rasgamiento) y luego el K_I necesario para propagar la fisura, después del primer rasgamiento, a través del segundo grano produciendo la rotura final del material. Adicionalmente, se estimaron los valores para el monocristal de aluminio, con la finalidad de comparar resultados obtenidos en la literatura. El σ_o se tomó de las curvas esfuerzo-deformación del ensayo de tensión presentadas en la figura 21, el CTOD se estimó de la abertura de la fisura justo antes de que se propagará, este procedimiento se explica con mayor detalle en la sección 5.4.3. En la tabla 4 se presentan los valores estimados para el intensificador de esfuerzos para diferentes tamaños de fisura inicial.

Tabla 4. K_I para monocristal, primer rasgamiento en el bicristal y falla final en el bicristal.

| l_0 | K_I (MPa \sqrt{m}) | K_I (MPa \sqrt{m}) | K_I (MPa \sqrt{m}) |
|-------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| | Falla monocristal | Primer rasgamiento | Falla bicristal |
| 5a | 0.47 | 0.44 | 0.98 |
| 10a | 0.44 | 0.43 | 0.933 |
| 15a | 0.42 | 0.41 | 0.931 |
| 20a | 0.40 | 0.42 | 0.869 |

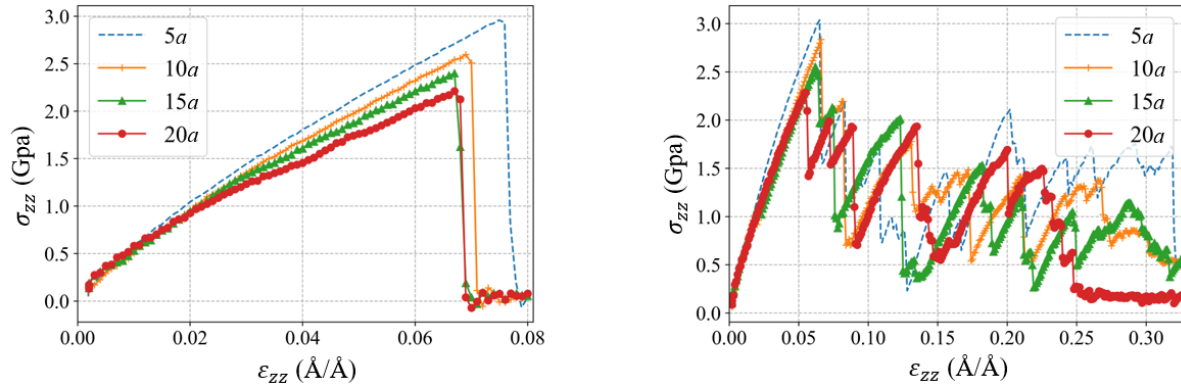


Fig. 21. σ vs. ϵ_{zz} para monocristal y bicristal.

5.4 Estimaciones de J

5.4.1 Velocidad de liberación de energía de deformación

La estimación de la velocidad de liberación de energía está definida como la energía invertida en la generación de una nueva fisura y su estimación se hace conforme a la formula [53,89]:

$$J\text{-ERR} = -\frac{d\Pi}{dt\Delta l} = -\frac{\Delta(U-W)}{dt\Delta l} = -\frac{(U_f - U_0) - (W_f - W_0)}{t\Delta l} \quad (30)$$

donde Π es la energía potencial, U es la energía de deformación almacenada en el sólido, W es el trabajo externo aplicado y $(t\Delta l)$ representa el área de la fisura, t es el espesor del sistema, Δl es la longitud de la nueva fisura creada. Para estimar J máxima en el primer rasgamiento, W_f , U_f , Δl y t fueron obtenidas justo después que l_0 comenzó a propagarse y para el valor de J máxima alcanzada durante toda la simulación, W_f , U_f , Δl y t fueron estimadas en la fractura final tal como se presenta en la figura 21, para el caso específico del bicristal con $l_0 = 20a$.

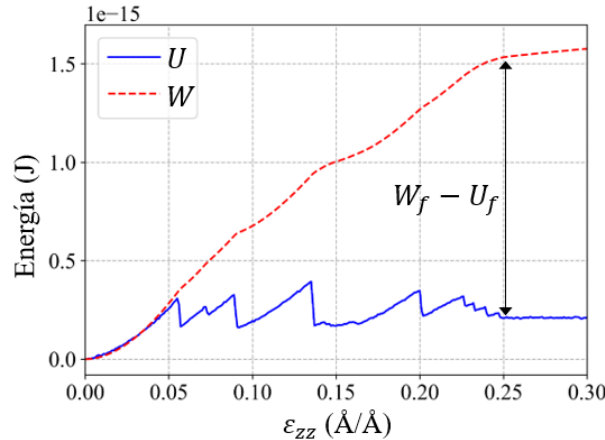


Fig. 22. W y U durante el ensayo de tensión para el bicristal con $l_0 = 20a$.

La fractura final se considera cuando U o σ_{zz} desciende hasta un valor constante cercano a cero (ver figuras 21 y 22). Es importante tener en cuenta que Buehler et al. [89] usó esta misma metodología, pero despreciando la diferencia en la energía de deformación. La energía de deformación en la presente investigación, se calculó como la diferencia entre la energía potencial

antes y después del proceso de deformación del sistema. El trabajo externo requerido para alcanzar una deformación unitaria específica ε'_{zz} se calcula como se propone en [51] para un ensayo de tensión uniaxial. En este sentido, W se calculó numéricamente como la integral de la curva esfuerzo global del sistema vs. deformación y se multiplicó posteriormente por el volumen del sistema.

$$W = V \int_0^{\varepsilon'_{zz}} \sigma_{zz} d\varepsilon_{zz} \quad (31)$$

5.4.2 Integral J de contorno

Rice propuso la siguiente expresión [53,56] para calcular J alrededor de un camino cualquiera que envuelve la punta de la fisura (Γ).

$$J = \int_{\Gamma} \left(w dz - T_i \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x} ds \right) \quad (32)$$

donde Γ es seleccionado y dividido en cinco segmentos (Γ_p ; donde $p = 1, 2, \dots, 5$) tal como se muestra en la figura 23.

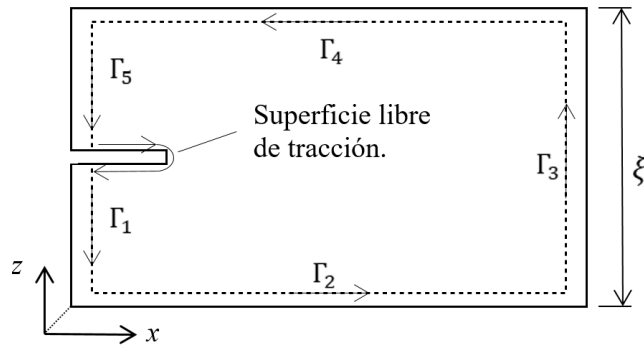


Fig. 23. Camino seleccionado para evaluar la integral J de contorno.

u_i en la ecuación 32 denota las componentes del vector de desplazamientos, ds es el incremento de longitud a lo largo de Γ , w es la densidad de energía de deformación y T_i hace referencia a las componentes del vector de tracción [53], el cual está definido para cada camino como:

$$T_i^{\Gamma p} = \sigma_{ij}^{\Gamma p} n_j \quad (33)$$

donde $\sigma_{ij}^{\Gamma p}$ es el tensor de esfuerzos a lo largo de Γ_p , i, j son las x, y, z componentes y n_j con las componentes del vector unitario normal al camino Γ_p . Finalmente la densidad de energía de deformación está dada por [53]:

$$w^{\Gamma p} = \int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij}^{\Gamma p} d\varepsilon_{ij} \quad (34)$$

donde ε_{ij} es el tensor de deformaciones a lo largo del camino Γ_p . En este punto, se necesita conocer $\sigma_{ij}^{\Gamma p}$ para poder determinar $w^{\Gamma p}$. Implementando el método de Hardy para calcular el tensor de esfuerzos local σ'_{ij} (explicado en el capítulo anterior), se calcularon el tensor de esfuerzos $\sigma_{ij}^{\Gamma p}$

como el promedio de los σ'_{ij} a lo largo de cada Γ_p . Los resultados de estos cálculos permitieron confirmar las consideraciones de Rice propuestas en [56], y las cuales se enumeran a continuación:

1. En las porciones del camino a lo largo de las superficies de la fisura $T_i = 0$ y $dz = 0$, por lo tanto, acorde a la figura: $J = J_1 + J_2 + J_3 + J_4 + J_5$
2. En los caminos uno (Γ_1) y cinco (Γ_5), se calculó $\sigma_{ij}^{\Gamma_{1,5}}$ y se verificó que $\sigma_{ij}^{\Gamma_{1,5}} = 0$, por lo cual $w = 0$ y $T_i = 0$, entonces queda, $J_1 = J_5 = 0$.
3. En los caminos dos (Γ_2) y cuatro (Γ_4) claramente $dz = 0$. En adición, $T_i^{\Gamma_{2,4}} = (0, 0, \sigma_{ij}^{\Gamma_{2,4}})$, $(\partial u_i / \partial x)^{\Gamma_{2,4}} = (\partial u_x / \partial x, 0, 0)^{\Gamma_{2,4}}$ donde las componentes del gradiente de deformación (D_{ij}) fueron estimadas mediante OVITO, luego $T_i \cdot \partial u_i / \partial x = 0$ y $J_2 = J_4 = 0$.
4. Debido a las condiciones de superficie libre a lo largo del camino tres, $T_i^{\Gamma_3} = 0$.

En la ecuación 34, solo la componente $\sigma_{zz}^{\Gamma_3}$ es considerada, puesto que las magnitudes de las componentes restantes en el tensor $\sigma_{ij}^{\Gamma_3}$ son despreciables. Por lo tanto, la integral de contorno para el camino seleccionado, queda dada por $J = J_3$.

$$J = \int_{\Gamma_3} w dz = \int_0^\xi w^{\Gamma_3} dz = w^{\Gamma_3} \xi = \left(\int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij}^{\Gamma_3} d\varepsilon_{ij} \right) \xi = \left(\int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{zz}^{\Gamma_3} d\varepsilon_{ij} \right) \xi \quad (35)$$

donde ξ es la altura del sistema (ver figura 23). Con la finalidad de verificar que $\sigma_{zz}^{\Gamma_3}$ es constante y tiende a tener la misma magnitud que el esfuerzo global del sistema σ_{zz} a una ε_{zz} específica, se realizó el cálculo de $\sigma_{zz}^{\Gamma_3}$ y se comprobó la afirmación anterior, tal como se presenta en la siguiente figura, para el caso del monocristal y el bicristal con $l_0 = 10a$.

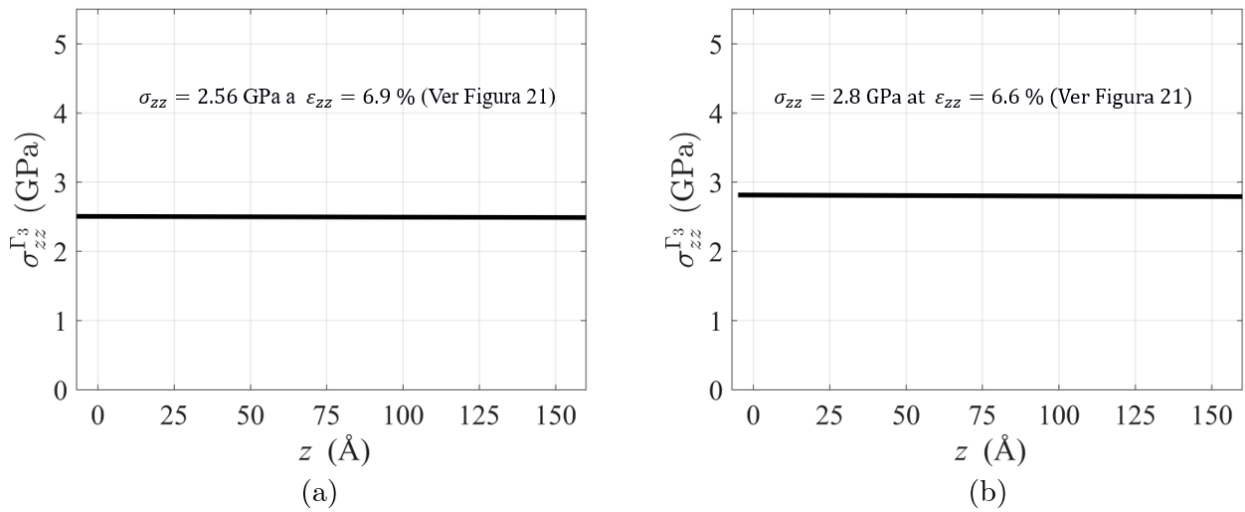


Fig. 24. $\sigma_{zz}^{\Gamma_3}$ para (a) monocristal a $\varepsilon_{zz} = 6.9\%$; (b) bicristal a $\varepsilon_{zz} = 6.6\%$.

La diferencia entre $\sigma_{zz}^{\Gamma_3}$ y σ_{zz} fue menor a 5%. Por lo tanto, w^{Γ_3} para el primer rasgamiento y para la fractura final se calculó a partir de la integral numérica de la curva σ_{zz} vs. ε_{zz} del ensayo de tensión uniaxial. Es decir:

$$J\text{-CI} = \xi \int_0^{\varepsilon_{zz}} \sigma_{zz} d\varepsilon_{zz} \quad (36)$$

5.4.3 Desplazamiento de la apertura de la punta de la fisura CTOD

Este método también considera que ERR es equivalente a J [53] y usando las ecuaciones propuestas por Irwing que relaciona el CTOD con la ERR [53,102], se puede obtener que:

$$J\text{-CTOD} = \frac{4}{\pi \cdot \text{CTOD} \cdot \sigma_o} \quad (37)$$

donde σ_o es el esfuerzo global máximo en la dirección z durante toda la simulación y CTOD es estimado como la distancia entre dos átomos seleccionados tal como se presenta en la figura 25, para el caso del monocristal y después del primer rasgamiento en el bicristal:

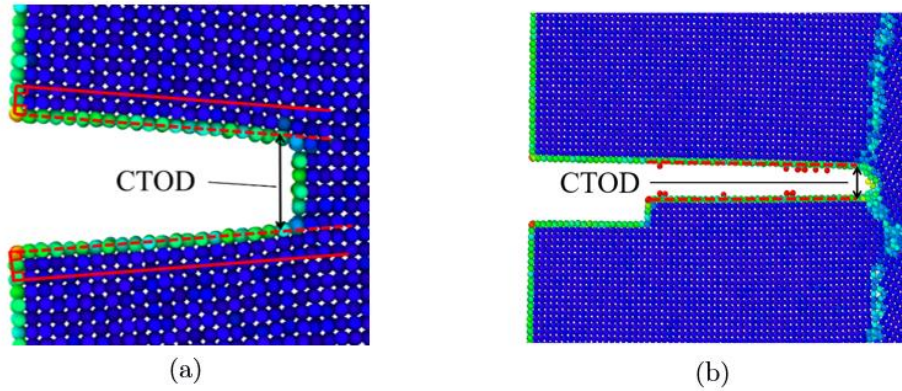


Fig. 25. CTOD (a) monocristal con $l_0 = 10a$; (b) bicristal después del primer rasgamiento con $l_0 = 10a$. Skogsrud y Thaulow [103] también usaron una metodología similar para estimar el CTOD en simulaciones moleculares. Los valores obtenidos para el CTOD de los resultados de las simulaciones del ensayo de tensión se presentan en la figura 26 para los monocristales (SC) y bicristales (BC) con diferentes tamaños de fisura inicial.

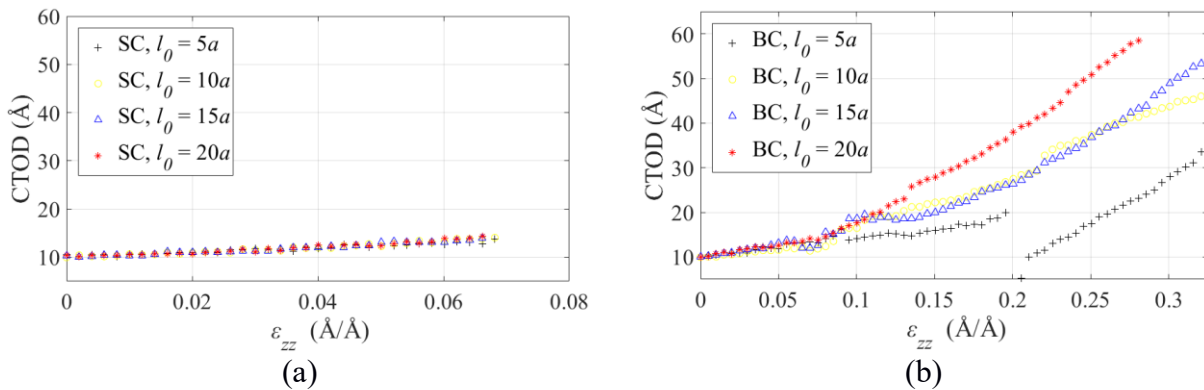


Fig. 26. CTOD vs. ε_{zz} para (a) monocristales y (b) bicristales.

5.5 Propagación de las nano-fisuras

Para bicristales, la nano-fisura comienza a propagar en valores de ε_{zz} similares a los del cristal simple, para $l_0 > 5a$. Luego la nano-fisura, en los bicristales, se detiene en la frontera de grano (esto es lo que consideramos la etapa del primer rasgamiento y que solo se da en los bicristales). Después que la nano-fisura llega a la frontera de grano, comienza un proceso de falla muy similar al de los materiales dúctiles, viz., nucleación de vacancias, seguido por su crecimiento y coalescencia. En el caso de los monocristales. La propagación de las nano-fisuras a través de todo el cristal fue inestable, similar a la fractura en materiales frágiles. La figura 27 muestra la propagación de la nano-fisura para $l_0 = 15a$ usando el parámetro de centro-simetría.

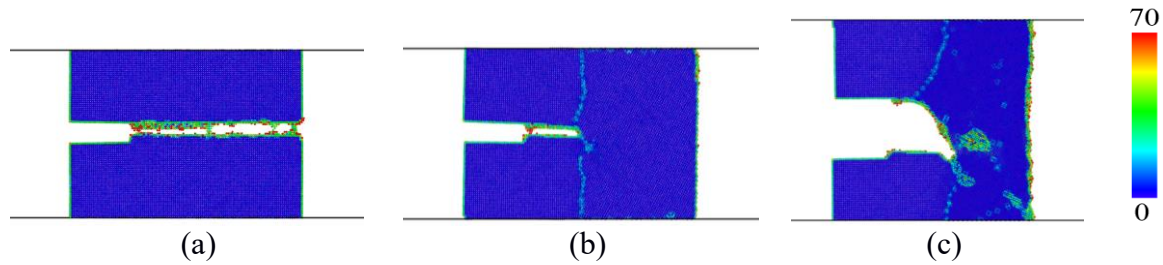


Fig. 27. (a) Propagación de fisura en monocristal a $\varepsilon_{zz} = 6.8\%$; (b) primer rasgamiento a $\varepsilon_{zz} = 6.5\%$; y (c) fractura final bicristal con coalescencia de vacancias en el segundo cristal a $\varepsilon_{zz} = 30\%$.

5.6 Rasgamiento y fractura

Los valores máximos de J alcanzados antes del primer rasgamiento (fenómeno observado solamente en los bicristales) fueron comparados con los valores máximos de J durante toda la simulación para el caso de los monocristales, tal como se muestra en la figura 28.

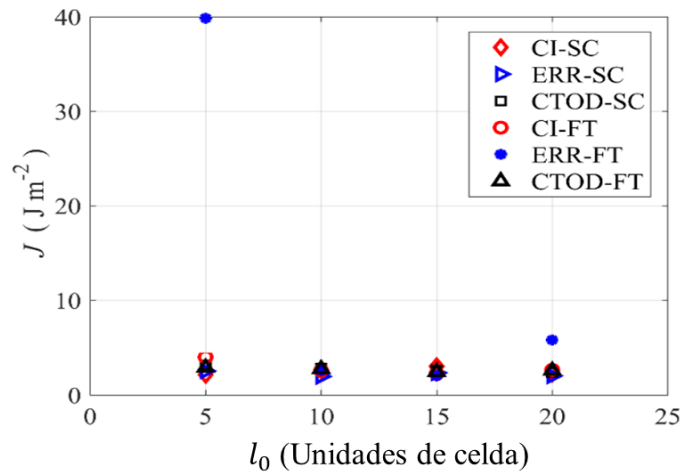


Fig. 28. Valores máximos de J para monocristales (SC) y para primer rasgamiento (FT) en bicristales.

Valores similares se obtuvieron usando los tres métodos para $l_0 = 10a$ y $l_0 = 15a$, además es importante mencionar que no se observaron dislocaciones generadas al interior de los cristales

antes y en un paso de tiempo después del primer rasgamiento (para $l_0 > 5a$), tal como se muestra en la figura 29, para el caso de $l_0 = 10a$.

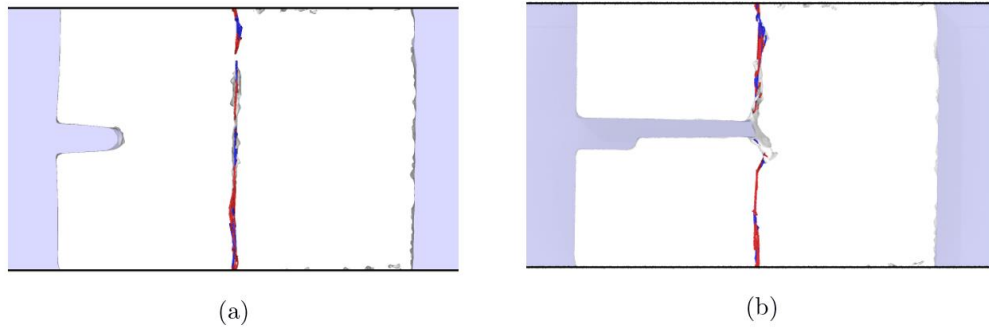


Fig. 29. DXA en bicristales con $l_0 = 10a$ (a) antes del primer rasgamiento ($\varepsilon_{zz} = 6.6\%$); y (b) después del primer rasgamiento ($\varepsilon_{zz} = 6.7\%$).

Por un lado, para $l_0 = 5a$ y $l_0 = 20a$ los valores máximos de J antes del primer rasgamiento estimados mediante ERR no fueron acordes con los resultados del monocristal para los mismos tamaños de nano-fisura inicial. Por otro lado, para $l_0 = 5a$ se obtuvo la misma inconsistencia al implementar el método de la integral de contorno. Sin embargo, solo los resultados del método CTOD fueron consistentes, dando valores similares de J para el primer rasgamiento en los bicristales y el máximo J en los monocristales con las mismas l_0 . Las dislocaciones comenzaron a aparecer en los bicristales con $l_0 = 5a$ y $l_0 = 20a$ cuando $\varepsilon_{zz} = 8.1\%$ y $\varepsilon_{zz} = 5.5\%$ respectivamente, y después del primer rasgamiento cuando $\varepsilon_{zz} = 20.1\%$ y $\varepsilon_{zz} = 7.1\%$. La figura 30 muestra los valores máximos de J calculados para monocristal y el bicristal durante todo el proceso de deformación hasta la fractura final con diferentes l_0 .

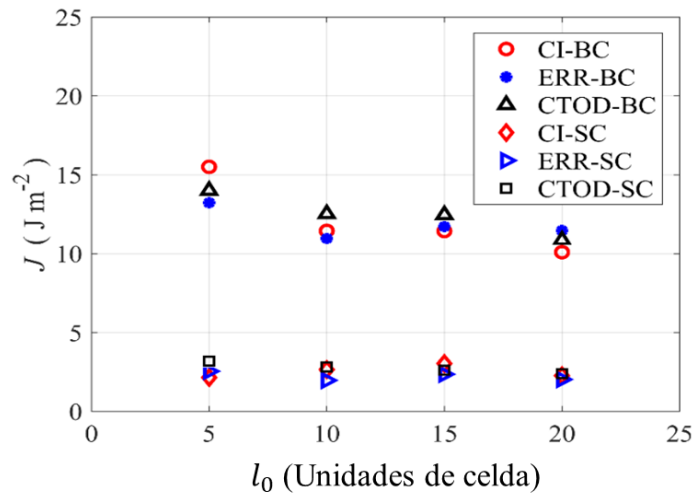


Fig. 30. Máximos J para monocristales (SC) y bicristales (BC).

Los valores usados para estimar J -CI, J -ERR y J -CTOD son presentados en la tabla 5.

Tabla 5. Datos usados para el cálculo de las máximas J .

| | l_0 | ξ (m) | w (Pa) | W_f (J) | U_f (J) | Δl (m) | t (m) | σ_o (Pa) | CTOD (m) |
|---------------------------------|-------|-----------|----------|-----------|-----------|----------------|---------|-----------------|----------|
| Fractura final en monocristal | 5a | 1.76E-8 | 1.22E+8 | 6.24E-16 | 2.14E-16 | 2.03E-8 | 7.95E-9 | 2.96E+9 | 1.37E-9 |
| | 10a | 1.75E-8 | 1.51E+8 | 4.85E-16 | 1.75E-16 | 1.98E-8 | 7.95E-9 | 2.56E+9 | 1.41E-9 |
| | 15a | 1.74E-8 | 1.74E+8 | 4.45E-16 | 1.29E-16 | 1.68E-8 | 7.98E-9 | 2.38E+9 | 1.40E-9 |
| | 20a | 1.75E-8 | 1.29E+8 | 4.09E-16 | 1.51E-16 | 1.60E-8 | 7.98E-9 | 2.13E+9 | 1.43E-9 |
| Primer rasgamiento en bicristal | 5a | 1.80E-8 | 2.23E+8 | 7.30E-16 | 1.63E-16 | 2.03E-9 | 7.02E-9 | 3.04E+9 | 1.21E-9 |
| | 10a | 1.72E-8 | 1.49E+8 | 4.87E-16 | 3.26E-16 | 8.10E-9 | 8.01E-9 | 2.84E+9 | 1.23E-9 |
| | 15a | 1.76E-8 | 1.28E+8 | 4.15E-16 | 3.16E-16 | 6.08E-9 | 8.02E-9 | 2.55E+9 | 1.22E-9 |
| | 20a | 1.78E-8 | 1.49E+8 | 4.83E-16 | 2.78E-16 | 4.46E-9 | 7.94E-9 | 2.28E+9 | 1.44E-9 |
| Fractura final en bicristal | 5a | 2.23E-8 | 6.96E+8 | 2.37E-15 | 3.22E-16 | 2.23E-8 | 6.96E-9 | 3.04E+9 | 5.87E-9 |
| | 10a | 2.16E-8 | 5.29E+8 | 1.71E-15 | 2.50E-16 | 1.67E-8 | 8.00E-9 | 2.84E+9 | 5.62E-9 |
| | 15a | 2.23E-8 | 5.12E+8 | 1.64E-15 | 2.66E-16 | 1.47E-8 | 7.99E-9 | 2.55E+9 | 6.22E-9 |
| | 20a | 2.12E-8 | 4.75E+8 | 1.53E-15 | 2.08E-16 | 1.44E-8 | 8.04E-9 | 2.28E+9 | 6.06E-9 |

Al reemplazar estos valores en las respectivas ecuaciones, se encontraron los valores de J presentados en la tabla 6.

Tabla 6. Valores máximos de J .

| l_0 | Fractura final en monocristal | | | Primer rasgamiento en bicristal | | | Fractura final en bicristal | | |
|-------|--------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|
| | J -CI (Jm ⁻²) | J -ERR (Jm ⁻²) | J -CTOD (Jm ⁻²) | J -CI (Jm ⁻²) | J -ERR (Jm ⁻²) | J -CTOD (Jm ⁻²) | J -CI (Jm ⁻²) | J -ERR (Jm ⁻²) | J -CTOD (Jm ⁻²) |
| 5a | 2.14 | 2.54 | 3.18 | 4.01 | 39.85 | 2.88 | 15.50 | 13.23 | 14.00 |
| 10a | 2.64 | 1.96 | 2.83 | 2.57 | 2.47 | 2.74 | 11.44 | 10.96 | 12.52 |
| 15a | 3.03 | 2.35 | 2.60 | 2.25 | 2.02 | 2.44 | 11.43 | 11.72 | 12.46 |
| 20a | 2.26 | 2.02 | 2.38 | 2.65 | 5.80 | 2.58 | 10.09 | 11.47 | 10.85 |

5.7 Discusión

Los valores estimados del K_I son similares para el monocristal y el primer rasgamiento en el bicristal, lo mismo pasa para J -CTOD, para J -CI fueron los mismos para $l_0 = 10a$ y $l_0 = 15a$, sin embargo J -ERR para $l_0 = 5a$ tiene un valor que se aleja significativamente del primer rasgamiento, esto se considera debido al comportamiento dúctil en el bicristal para $l_0 = 5a$, esta fisura es muy pequeña para generar un rasgamiento frágil como ocurrió con el resto de los l_0 y esto es debido a que el método ERR no es recomendable para la descripción de la fractura dúctil.

5.8 Conclusiones

Durante el proceso de estimación de los indicadores de la tenacidad a la fractura, K_I , J -ERR, J -CI y J -CTOD a partir de los resultados de las simulaciones DM se encontraron los siguientes hallazgos:

- Los esfuerzos locales promediados a lo largo de los caminos para evaluar la J -CI coinciden con las suposiciones de Rice.

- Los valores de J y del K_I para el monocristal coinciden con el orden de magnitud de los valores reportados en la literatura para tamaños de fisura similares.
- Por valores de $l_0 = 5a$ se observó un comportamiento dúctil en el primer cristal y para valores mayores de l_0 el comportamiento en el cristal fue frágil.
- En un bicristal, existe un tamaño crítico de l_0 por encima del cual se obtendrá fractura frágil y por debajo una fractura dúctil en el cristal con fisurado.

Capítulo 6

Metodología para estimar la tenacidad a la fractura en cristales y bicristales de aluminio.

6.1 Introducción

La tenacidad a la fractura en escala nanométrica se ha estimado como el valor crítico de los parámetros K_I , J , ERR, CTOD (valor máximo alcanzado justo antes de la fractura), sin embargo, los valores críticos han sido estimados para un solo tamaño de fisura. Tal es el caso de Jin y Yuan [100] que estimaron un J_C con el método de la integral de contorno y ERR para grafeno usando resultados de simulaciones DM. El valor crítico de la ERR_C ha sido usado como la tenacidad en esta escala debido a su formulación energética [50,104–107] en materiales sin frontera de grano. La ERR no es apropiada para describir el comportamiento de materiales dúctiles, y tal como se presentó en el capítulo 3, los monocristales siempre se comportaron como materiales frágiles y la ductilidad de un material se debe a la dinámica de dislocaciones generadas por la inclusión de una GB. El método del CTOD ha sido implementado de igual forma para estimar la tenacidad a la fractura [50,108,109], sin embargo nuevamente lo hacen para monocristales sin frontera de grano. En este capítulo se desarrolla una metodología novedosa para estimar un valor de la tenacidad a la fractura que es válido para todos los tamaños de fisura en un monocristal o bicristal. La metodología fue implementada usando por separado los resultados de los parámetros de la mecánica de la fractura. Todos los métodos ajustaron de forma correcta en la estimación de la tenacidad a la fractura del monocristal y del bicristal. Sin embargo, al estudiar el primer rasgamiento, en el cual, el valor del parámetro evaluado debía ser similar al valor de la tenacidad del monocristal, se encontró que solo el CTOD arrojó resultados acordes con la tenacidad a la fractura del monocristal. Los valores de los indicadores J -CI y J -ERR se alejaron del valor esperado para $l_0 = 5a$. Esto se considera debido a la dinámica de dislocaciones presentes durante el primer rasgamiento, propio de los materiales dúctiles.

6.2 Tenacidad a la fractura K_C

Para estimar la tenacidad a la fractura usando K_I se realizó un gráfico adimensional de σ_{zz}/S_U vs. l_0/L (con $L = 60a$). Donde el esfuerzo último a la tensión (S_U) para el monocristal sin defecto se obtiene de la figura 20, $S_U = 6.182$ Gpa, valor que coincide con el reportado por Tang y Yang en [82] para las mismas velocidades de deformación. Implementando la teoría de la mecánica de la fractura lineal elástica (LEFM), usando la forma alternativa como plantea [51]:

$$\sigma_{zz} = \frac{K_I}{f\sqrt{\pi \cdot l_0}} \quad (38)$$

Los valores de K_I son los reportados en la tabla 4 y tomando que f para una fisura de borde está dado por [53]:

$$f = 0.265(1 - \gamma)^4 + \frac{0.857 + 0.265\gamma}{(1 - \gamma)^{\frac{3}{2}}}, \quad (39)$$

donde $\gamma = l_0/60a$. En la figura 31 se presenta con círculos y triángulos los valores normalizados de la ecuación 38 (σ_{zz}/S_U) con los K_I para la falla del bicristal y los K_I para la falla del monocristal respectivamente (ver tabla 4). Para ajustar un único valor de K_I en la función de la ecuación 38 normalizada, se utilizó el método de los mínimos cuadrados y el valor que mejor ajustó, todos los puntos de la gráfica, para el caso del monocristal fue $K_C = 0.45 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, el cual coincide con el valor encontrado por Chandra [15] usando el método de Griffith, sin embargo hay que tener en cuenta que Chandra et al. hicieron el estimado con un solo tamaño de fisura. Para el caso del bicristal (BC), al compararlo con los resultados obtenido mediante DM, el valor que mejor ajustó fue $K_C = 0.95 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.

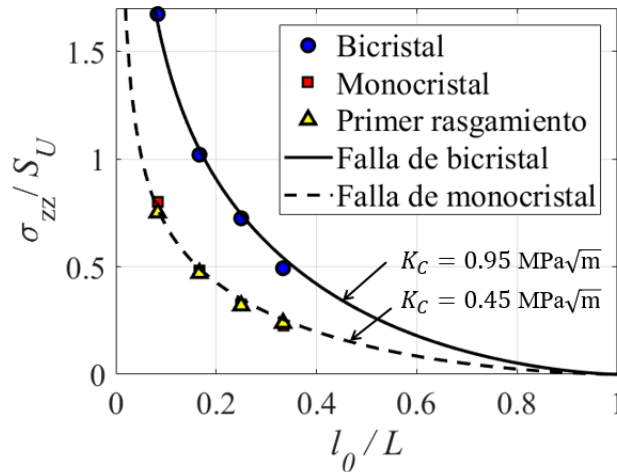


Fig. 31. Esfuerzo normalizado σ_{zz}/S_U vs. l_0/L para estimar K_C .

6.3 Tenacidad a la fractura J_C

Con la finalidad de caracterizar la tenacidad a la fractura en función de J , se implementaron las ecuaciones de la mecánica de la fractura lineal elástica que relaciona el intensificador de esfuerzos en modo I con la integral J , con condiciones de deformación plana [51]. Las condiciones de frontera periódicas en la dirección y del espécimen garantizan la deformación plana, puesto que se considera un material con espesor infinito. La ecuación queda de la siguiente forma:

$$K_I = \sqrt{J \cdot \frac{E}{1 - \nu^2}} \quad (40)$$

en esta ecuación K_I se reemplaza por [51]:

$$K_I = f \cdot \sigma_{zz}^{eq} \sqrt{\pi \cdot l_0} \quad (41)$$

Igualando las ecuaciones 40 y 41 se puede obtener la siguiente expresión para σ_{zz}^{eq} :

$$\sigma_{zz}^{eq} = \sqrt{\frac{J \cdot E / (1 - \nu^2)}{f^2 \cdot \pi \cdot l_0}} \quad (42)$$

Con la finalidad de normalizar el esfuerzo equivalente σ_{zz}^{eq} de la ecuación 42 se usa nuevamente S_U del monocristal sin defecto de la figura 20. La estrategia para ajustar un valor único de J valido para todos los tamaños de fisura inicial consistió en construir una gráfica del esfuerzo normalizado (σ_{zz}^{eq}/S_U) vs. l_0/L . En esta grafica se ubican los puntos del esfuerzo normalizado al evaluar los valores máximos de la integral J calculados utilizando por los métodos de CTOD, ERR y CI para los diferentes tamaños de fisura inicial $l_0 = 5a, 10a, 15a, 20a$. Posteriormente, se ajusta la ecuación 42 normalizada a los puntos con un solo valor de J que es el considerado como la tenacidad a la fractura para cualquier tamaño de fisura inicial. A continuación, se presentan los resultados de las curvas ajustadas con sus respectivos valores de J_C , para el caso del monocristal y del bicristal.

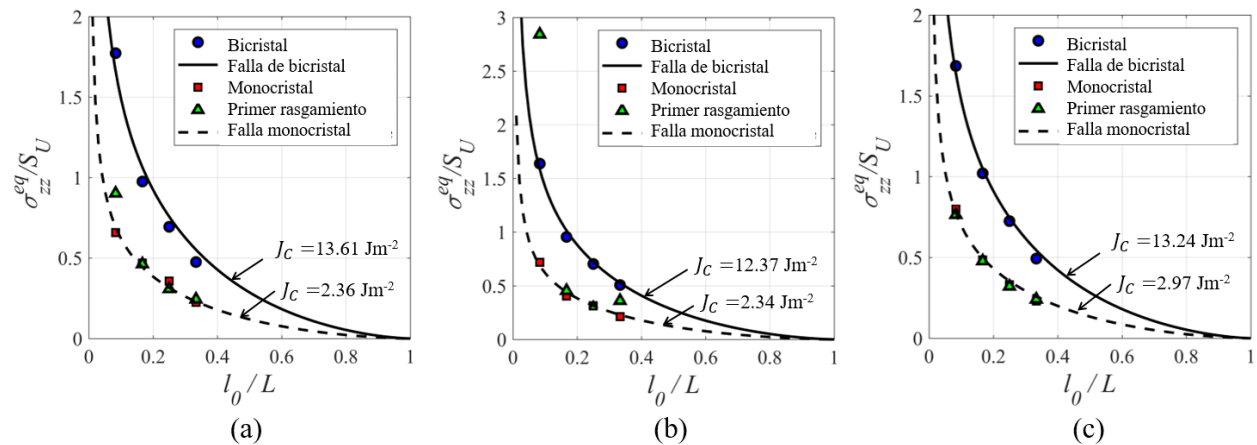


Fig. 32. Esfuerzo equivalente normalizado estimado mediante (a) CI (b) ERR y (c) CTOD.

Las curvas fueron ajustadas a los datos usando el método de mínimos cuadrados. Chandra et al. [15] reportó valores similares de la tenacidad para monocristales, pero para un solo tamaño específico de l_0 . En la siguiente tabla se presentan los valores de tenacidad a la fractura para cada método.

Tabla 7. Tenacidad a la fractura para el monocristal y el bicristal.

| | $J_C - CI (Jm^{-2})$ | $J_C - ERR (Jm^{-2})$ | $J_C - CTOD (Jm^{-2})$ |
|-------------|----------------------|-----------------------|------------------------|
| Monocristal | 2.36 | 2.34 | 2.97 |
| Bicristal | 13.61 | 12.37 | 13.24 |

6.4 Discusión

Al comparar los valores de la tenacidad a la fractura del monocristal y el bicristal, se puede observar que J_C del bicristal se aumenta en un 577%, 529% and 445% del valor de J_C del monocristal, para los métodos CI, ERR y CTOD respectivamente. En este sentido, la frontera de

grano aumenta la tenacidad del material de forma significativa. Con la finalidad de determinar cuál de los métodos tiene menor error, se calcula el error de las curvas ajustadas en comparación a los datos usando mínimos cuadrados, para cada método. Los valores se presentan en la tabla 8.

Tabla 8. Error de mínimos cuadrados para cada método.

| | CI | ERR | CTOD |
|--------------------|------------|------------|------------|
| Monocristal | 0.00352869 | 0.00249363 | 0.00211611 |
| Primer rasgamiento | 0.04447074 | 4.65584299 | 0.00194489 |
| Bicristal | 0.03016880 | 0.00723650 | 0.00614448 |

6.5 Conclusiones

En este capítulo se desarrolló e implementó una nueva metodología para estimar la tenacidad a la fractura en materiales NC que es válida para cualquier tamaño de la fisura inicial y se encontraron los siguientes hallazgos:

- El CTOD es el método que menor error residual tiene para todos los casos: monocristal, primer rasgamiento y bicristal.
- La metodología propuesta permite estimar un valor único de tenacidad a la fractura para el monocristal y el bicristal que es válido para cualquiera de los tamaños de fisuras evaluados.
- El CTOD es el único método de los tres usados que permite estimar un valor de J y de K_I durante el primer rasgamiento acorde a la tenacidad calculada del monocristal.
- La inclusión de una frontera de grano aumenta significativamente la tenacidad a la fractura del material NC.

Capítulo 7

Conclusiones y trabajos futuros

7.1 Conclusiones

En este proyecto se desarrollaron simulaciones implementando DM para estudiar la tenacidad a la fractura en monocristales y bicristales de aluminio a partir de ensayos simulados de tensión uniaxial. J_C del monocristal y bicristal fueron calculados y comparados para establecer el efecto de la frontera de grano. Los principales hallazgos de esta investigación se resumen a continuación:

- El monocristal fisurado presentó un comportamiento de fractura frágil sin evidencia de emisión de dislocaciones. El mismo comportamiento frágil fue observado durante el primer rasgamiento de los bicristales con $l_0 = 10a$, $l_0 = 15a$ y $l_0 = 20a$. Sin embargo, las dislocaciones aparecieron antes del primer rasgamiento en los bicristales con $l_0 = 5a$. Por lo cual existe un tamaño crítico para el tamaño de fisura inicial por debajo del cual el material se comporta como dúctil en el primer cristal.
- La frontera de grano actuó como una barrera que frenó el crecimiento inestable de la fisura después del primer rasgamiento, cuando la fisura llegó a la frontera de grano comenzó un proceso de fractura dúctil, dando lugar a la nucleación de vacancias, seguido por crecimiento y coalescencia de estas hasta la fractura final.
- La tenacidad a la fractura J_C del monocristal coincide con la máxima J alcanzada durante el primer rasgamiento en los bicristales con $l_0 = 10a$ y $l_0 = 15a$ para los tres métodos empleados. Sin embargo, para el método del CTOD todos los valores coincidieron para todos los l_0 .
- J_C del bicristal de aluminio es casi cinco veces el valor del J_C del monocristal, basado en los resultados del método del CTOD.
- K_C del bicristal de aluminio es casi 2.5 veces el valor de K_C del monocristal.
- La metodología desarrollada para la estimación de la tenacidad a la fractura permite estimar un J_C válido para cualquier tamaño de fisura inicial en los monocristales y los bicristales de aluminio.

7.2 Trabajo futuros

Debido a la naturaleza del proyecto de investigación existieron efectos en las propiedades de los materiales que no lograron ser estudiados. Estos efectos, pueden ser desarrollados por otros investigadores en el área.

- El efecto de la variación en los ángulos de la frontera de grano. En este punto se pueden hacer ensayos con bicristales con diferentes ángulos, con la finalidad de observar la

variación en la tenacidad. Se pueden evaluar fronteras de grano mixtas y rotadas en cualquier otro NC.

- El efecto del tamaño de grano. En este ítem se pueden desarrollar policristales y realizar las mismas pruebas con la finalidad de cuantificar la tenacidad y observar el cambio de la tenacidad a la fractura en un policristal y cualquier otro tipo de NC.
- Se puede estudiar el efecto del incremento en la densidad de dislocaciones y el movimiento de los planos de deslizamiento durante cada paso de deformación en el ensayo de tensión para establecer correlaciones con la tenacidad a la fractura.
- Se puede intentar desarrollar experimentos del ensayo de tensión con filamentos de cristal simple de aluminio para tener resultados experimentales propios aparte de los encontrados en la literatura.

Bibliografía

- [1] N.M. Pugno †, R.S. Ruoff ‡, Quantized fracture mechanics, *Philos. Mag.* 84 (2004) 2829–2845. doi:10.1080/14786430412331280382.
- [2] T. Shimada, K. Ouchi, Y. Chihara, T. Kitamura, Breakdown of Continuum Fracture Mechanics at the Nanoscale, *Sci. Rep.* 5 (2015) 8596. doi:10.1038/srep08596.
- [3] D. Berman, J. Krim, Surface science, MEMS and NEMS: Progress and opportunities for surface science research performed on, or by, microdevices, *Prog. Surf. Sci.* 88 (2013) 171–211. doi:10.1016/j.progsurf.2013.03.001.
- [4] O. Auciello, A. V. Sumant, Status review of the science and technology of ultrananocrystalline diamond (UNCD) films and application to multifunctional devices, *Diam. Relat. Mater.* 19 (2010) 699–718. doi:10.1016/j.diamond.2010.03.015.
- [5] A. Herrera-May, L.A. Aguilera-Cortés, E. Manjarrez, M. González-Palacios, Sistemas Nanoelectromecánicos: Origen, Aplicaciones Y Desafíos, *Interciencia.* 35 (2010) 163–170.
- [6] R. a. Freitas Jr, Progress in nanomedicine and medical nanorobotics, *Handb. Theor. Comput. Nanotechnol.* 6 (2005) 1–25. doi:10.1166/jctn.2005.01.
- [7] M. Imboden, P. Mohanty, Dissipation in nanoelectromechanical systems, *Phys. Rep.* 534 (2014) 89–146. doi:10.1016/j.physrep.2013.09.003.
- [8] J.S. Murday, R.W. Siegel, J. Stein, J.F. Wright, Translational nanomedicine: status assessment and opportunities, *Nanomedicine Nanotechnology, Biol. Med.* 5 (2009) 251–273. doi:10.1016/j.nano.2009.06.001.
- [9] Z. Wang, L. Ci, L. Chen, S. Nayak, P.M.A. And, N. Koratkar, Polarity-Dependent Electrochemically Controlled Transport of Water through Carbon Nanotube Membranes, *Nano Lett.* 7 (2007) 697–702. doi:10.1021/NL062853G.
- [10] B. Watson, J. Friend, L. Yeo, Piezoelectric ultrasonic resonant motor with stator diameter less than 250 μm : the Proteus motor, *J. Micromechanics Microengineering.* 19 (2009) 22001. doi:10.1088/0960-1317/19/2/022001.
- [11] H.N. Wu, D.S. Xu, H. Wang, R. Yang, Molecular Dynamics Simulation of Tensile Deformation and Fracture of γ -TiAl with and without Surface Defects, *J. Mater. Sci. Technol.* 32 (2015) 1–10. doi:10.1016/j.jmst.2015.12.001.
- [12] T. Shimokawa, M. Tanaka, K. Kinoshita, K. Higashida, Roles of grain boundaries in

- improving fracture toughness of ultrafine-grained metals, *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* 83 (2011) 1–13. doi:10.1103/PhysRevB.83.214113.
- [13] D. Hou, T. Zhao, P. Wang, Z. Li, J. Zhang, Molecular dynamics study on the mode I fracture of calcium silicate hydrate under tensile loading, *Eng. Fract. Mech.* 131 (2014) 557–569. doi:10.1016/j.engfracmech.2014.09.011.
- [14] J. Petucci, C. Leblond, M. Karimi, Molecular dynamics simulations of brittle fracture in fcc crystalline materials in the presence of defects, *Comput. Mater. Sci.* 86 (2014) 130–139. doi:10.1016/j.commatsci.2014.01.049.
- [15] S. Chandra, N.N. Kumar, M.K. Samal, V.M. Chavan, R.J. Patel, Molecular dynamics simulations of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies, *Comput. Mater. Sci.* 117 (2016) 518–526. doi:10.1016/j.commatsci.2016.02.032.
- [16] T. Hanlon, E.D. Tabachnikova, S. Suresh, Fatigue behavior of nanocrystalline metals and alloys, *Int. J. Fatigue.* 27 (2005) 1147–1158. doi:10.1016/j.ijfatigue.2005.06.035.
- [17] R.C. Batra, A.A. Pacheco, Changes in internal stress distributions during yielding of square prismatic gold nano-specimens, *Acta Mater.* 58 (2010) 3131–3161. doi:10.1016/j.actamat.2010.01.054.
- [18] Y.C. Wang, A. Misra, R.G. Hoagland, Fatigue properties of nanoscale Cu/Nb multilayers, *Scr. Mater.* 54 (2006) 1593–1598. doi:10.1016/j.scriptamat.2006.01.027.
- [19] H.A.P. Li, B.L. Boyce, A Review of Fatigue Behavior in Nanocrystalline Metals, *Exp. Mech.* 50 (2010) 5–23. doi:10.1007/s11340-009-9301-2.
- [20] R.W. Armstrong, 60 Years of Hall-Petch: Past to Present Nano-Scale Connections, *Mater. Trans.* 55 (2014) 2–12. doi:10.2320/matertrans.MA201302.
- [21] E.N. Hahn, M.A. Meyers, Grain-size dependent mechanical behavior of nanocrystalline metals, *Mater. Sci. Eng. A.* (2015). doi:10.1016/j.msea.2015.07.075.
- [22] M.A. Tschopp, H.A. Murdoch, L.J. Kecskes, K.A. Darling, Bulk nanocrystalline metals: Review of the current state of the art and future opportunities for copper and copper alloys, *Miner. Met. Mater. Soc.* 66 (2014) 1000–1019. doi:10.1007/s11837-014-0978-z.
- [23] C.J. Ruestes, G. Bertolino, M. Ruda, D. Farkas, E.M. Bringa, Grain size effects in the deformation of [0 0 0 1] textured nanocrystalline Zr, *Scr. Mater.* 71 (2014) 9–12. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.09.010.
- [24] D. Terentyev, F. Gao, Blunting of a brittle crack at grain boundaries: An atomistic study in

- BCC Iron, *Mater. Sci. Eng. A.* 576 (2013) 231–238. doi:10.1016/j.msea.2013.04.012.
- [25] W. Peng, X. Yang, P. Di, Molecular dynamics investigation of the grain boundary migration hysteresis of nanocrystalline Ni under cyclic shear loading, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng. Model.* 25 (2017) 0–18. doi:10.1088/1361-651X/aa533.
- [26] W. Fang, H. Xie, F. Yin, J. Li, D.F. Khan, Q. Fang, Molecular dynamics simulation of grain boundary geometry on crack propagation of bi-crystal aluminum, *Mater. Sci. Eng. A.* (2016). doi:10.1016/j.msea.2016.04.077.
- [27] N. Gao, D. Perez, G.H. Lu, Z.G. Wang, Molecular dynamics study of the interaction between nanoscale interstitial dislocation loops and grain boundaries in BCC iron, *J. Nucl. Mater.* 498 (2018) 378–386. doi:10.1016/j.jnucmat.2017.10.069.
- [28] S. Chandra, M.K. Samal, V.M. Chavan, R.J. Patel, An atomistic study of resistance offered by twist grain boundaries to incoming edge dislocation in FCC metals, *Mater. Lett.* 180 (2016) 11–14. doi:10.1016/j.matlet.2016.05.074.
- [29] S. Chandra, N.N. Kumar, M.K. Samal, V.M. Chavan, S. Raghunathan, An atomistic insight into the fracture behavior of bicrystal aluminum containing twist grain boundaries, *Comput. Mater. Sci.* 130 (2017) 268–281.
- [30] J. Kacher, B.P. Eftink, B. Cui, I.M. Robertson, Dislocation interactions with grain boundaries, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 18 (2014) 227–243. doi:10.1016/j.cossms.2014.05.004.
- [31] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson, Mechanical properties of nanocrystalline materials, *Prog. Mater. Sci.* 51 (2006) 427–556. doi:10.1016/j.pmatsci.2005.08.003.
- [32] E. Arzt, Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints : a comparative review, *Acta Mater.* 46 (1998) 5611–5626.
- [33] R. Birringer, Nanocrystalline Materials *, *Mater. Sci. Eng. A.* 117 (1989) 33–43.
- [34] S. Yip, The strongest size, *Nature.* 391 (1998) 532–533.
- [35] C. Suryanarayana, Nanocrystalline materials, *Int. Mater. Rev.* 40 (1995) 41–64.
- [36] A.H. Chokshi, A. Rosen, J. Karch, H. Gleiter, On the validity of the hall-petch relationship in nanocrystalline materials, *Scr. Metall.* 23 (1989) 1679–1684.
- [37] K. Lu, M.L. Sui, An explanation to the abnormal hall-petch relation in nanocrystalline materials, *Scr. Metall.* 28 (1993) 1465–1470.
- [38] C.S. Pande, K.P. Cooper, Progress in Materials Science Nanomechanics of Hall – Petch

- relationship in nanocrystalline materials, *Prog. Mater. Sci.* 54 (2009) 689–706. doi:10.1016/j.pmatsci.2009.03.008.
- [39] F.A. Mohamed, Y. Li, Creep and superplasticity in nanocrystalline materials: current understanding and future prospects, *Mater. Sci. Eng. A.* 298 (2001) 1–15.
- [40] N. Wang, Z. Wang, K.T. Aust, U. Erb, Room temperature creep behavior of nanocrystalline produced by an electrodeposition technique, *Mater. Sci. Eng. A.* 237 (1997) 150–158.
- [41] H. Hahn, P. Mondal, K.A. Padmanabhan, Plastic deformation of nanocrystalline materials, *Acta Metall.* 9 (1997) 603–606.
- [42] V. Yamakov, D. Wolf, S.R. Phillpot, H. Gleiter, Grain-boundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular-dynamics simulation †, *Acta Mater.* 50 (2002) 61–73.
- [43] G.P. Potirniche, M.F. Horstemeyer, P.M. Gullett, B. Jelinek, Atomistic modelling of fatigue crack growth and dislocation structuring in FCC crystals, *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 462 (2006) 3707–3731. doi:10.1098/rspa.2006.1746.
- [44] L. Ma, S. Xiao, H. Deng, W. Hu, Molecular dynamics simulation of fatigue crack propagation in bcc iron under cyclic loading, *Int. J. Fatigue.* 68 (2014) 253–259. doi:10.1016/j.ijfatigue.2014.04.010.
- [45] X. Li, B. Bhushan, Fatigue studies of nanoscale structures for MEMS/NEMS applications using nanoindentation technique, *Surf. Coatings Technol.* 163–164 (2003) 521–526. doi:10.1016/S0257-8972(02)00662-X.
- [46] I.A. Ovid, Review on the fracture processes in nanocrystalline materials, *J. Mater. Sci.* 42 (2007) 1694–1708. doi:10.1007/s10853-006-0968-9.
- [47] D. Farkas, Fracture toughness from atomistic simulations: brittleness induced by emission of sessile dislocations, *Scr. Mater.* 39 (1998) 533–536. doi:10.1016/S1359-6462(98)00193-6.
- [48] J. Han, D. Sohn, W. Woo, D.-K. Kim, Molecular dynamics study of fracture toughness and trans-intergranular transition in bi-crystalline graphene, *Comput. Mater. Sci.* 129 (2017) 323–331. doi:10.1016/j.commatsci.2016.12.023.
- [49] H. Gao, B. Ji, Modeling fracture in nanomaterials via a virtual internal bond method, *Eng. Fract. Mech.* 70 (2003) 1777–1791. doi:10.1016/S0013-7944(03)00124-3.
- [50] S.F. Ferdous, A. Adnan, Mode-I Fracture Toughness Prediction of Diamond at the

- Nanoscale, J. Nanomechanics Micromechanics. 7 (2017) 1–10. doi:10.1061/(ASCE)NM.2153-5477.0000130.
- [51] N. Dowling, Mechanical Behavior of Materials, Fourth, PEARSON, 2012.
- [52] G.R. Irwin, Onset of Fast Crack Propagation in High Strength Steel and Aluminum Alloys., in: Sagamore Res. Conf. Proc., 1956: pp. 289–305.
- [53] T.L. Anderson, Fracture mechanics, Third, Taylor & Francis, 2005.
- [54] A. Wells, Unstable Crack Propagation in Metals: Cleavage and Fast Fracture, in: Proc. Crack Propag. Symp., Cranfield, UK, 1961: p. Paper 84.
- [55] G. Irwing, Plastic Zone Near a Crack and Fracture Toughness, in: Sagamore Res. Conf. Proc., 1961: pp. 63–78.
- [56] J.R. Rice, A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks, J. Appl. Mech. 35 (1968) 379–386. doi:10.1115/1.3601206.
- [57] R.J. Hardy, Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: Shock waves, J. Chem. Phys. 76 (1982) 622–628. doi:10.15713/ins.mmj.3.
- [58] W. Velilla-Díaz, A. Pacheco-sanjuan, H.R. Zambrano, The role of the grain boundary in the fracture toughness of aluminum bicrystal, Comput. Mater. Sci. 167 (2019) 34–41. doi:10.1016/j.commatsci.2019.05.031.
- [59] B.J. Alder, T.E. Wainwright, Phase Transition for a Hard Sphere System, J. Chem. Phys. 27 (1957) 1208. doi:10.1063/1.1743957.
- [60] B.J. Alder, T.E. Wainwright, Studies in Molecular Dynamics. I. General Method, J. Chem. Phys. 31 (1959) 459. doi:10.1063/1.1730376.
- [61] A. Rahman, Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon, Phys. Rev. 136 (1964) A 405-A 411.
- [62] F.H. Stillinger, A. Rahman, Improved simulation of liquid water by molecular dynamics, J. Chem. Phys. 60 (1974) 1545–1557.
- [63] W.T. Ashurst, W.G. Hoover, Microscopic fracture studies in the two-dimensional triangular lattice, Phys. Rev. B. 14 (1976) 1465–1473.
- [64] B. DeCelis, A.S. Argon, S. Yip, Molecular dynamics simulation of crack tip processes in aluminum and copper, J. Appl. Phys. 54 (1983) 4864–4878. doi:10.1063/1.332796.
- [65] V. Shastry, D. Farkas, Atomistic simulation of fracture in CoAl and FeAl, Intermetallics. 6

- (1998) 95–104.
- [66] I.R. Vatne, E. Østby, C. Thaulow, D. Farkas, Quasicontinuum simulation of crack propagation in bcc-Fe, *Mater. Sci. Eng. A.* 528 (2011) 5122–5134. doi:10.1016/j.msea.2011.03.006.
- [67] M.E. Tuckerman, *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*, Oxford University Press, 2013.
- [68] S. Nosé, A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 511. doi:10.1063/1.447334.
- [69] S. Nosé, M.L. Klein, Constant pressure molecular dynamics for molecular systems, *Mol. Phys.* 50 (1983) 1055–1076.
- [70] M.J. Buehler, *Atomistic Modeling of Materials Failure*, Springer US, Boston, MA, 2008. doi:10.1007/978-0-387-76426-9.
- [71] R. Clausius, On a mechanical theorem applicable to heat, London, Edinburgh, Dublin *Philos. Mag. J. Sci.* 40 (1870) 122–127.
- [72] J.C. Maxwell, Van der Waals on the Continuity of the Gaseous and Liquid States, *Nature.* x (1874) 407–415.
- [73] J.C. Maxwell, On reciprocal figures, frames and diagrams of forces, in: *R. Soc. EDINBURGH*, 1870: pp. 53–55.
- [74] A.P. Thompson, S.J. Plimpton, W. Mattson, General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions, *J. Chem. Phys.* 131 (2009) 1–6. doi:10.1063/1.3245303.
- [75] J.E. Jones, P.R.S.L. A, On the Determination of Molecular Fields . II . From the Equation of State of a Gas, in: *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 1924: pp. 463–477. doi:10.1098/rspa.1924.0082.
- [76] V. Shastry, D. Farkas, molecular statics simulation of crack propagation in a-Fe using eam potentials, 409 (1996) 75–80.
- [77] M.I. Mendeleev, M.J. Kramer, C.A. Becker, M. Asta, Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu, *Philos. Mag.* 88 (2008) 1723–1750. doi:10.1080/14786430802206482.
- [78] M.F. Horstemeyer, D. Farkas, S. Kim, T. Tang, G. Potirniche, Nanostructurally small cracks (NSC): A review on atomistic modeling of fatigue, *Int. J. Fatigue.* 32 (2010) 1473–1502.

- doi:10.1016/j.ijfatigue.2010.01.006.
- [79] W. Fang, H. Xie, F. Yin, J. Li, D.F. Khan, Q. Fang, Molecular dynamics simulation of grain boundary geometry on crack propagation of bi-crystal aluminum, *Mater. Sci. Eng. A.* 666 (2016) 314–319. doi:10.1016/j.msea.2016.04.077.
- [80] R.E. Jones, J.A. Zimmerman, The construction and application of an atomistic J-integral via Hardy estimates of continuum fields, *J. Mech. Phys. Solids.* 58 (2010) 1318–1337. doi:10.1016/j.jmps.2010.06.001.
- [81] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short – Range Molecular Dynamics, *J. Comput. Phys.* 117 (1995) 1–19. doi:10.1006/jcph.1995.1039.
- [82] B. Tang, R. Yang, Molecular Dynamics Study of Uniaxial Deformation in Perfect and Defective Aluminum, *Chinese J. Phys.* VOL. 53 (2015) 1–13. doi:10.6122/CJP.20150928A.
- [83] C.L. Kelchner, S.J. Plimpton, J.C. Hamilton, Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation, 58 (1998) 85–88.
- [84] A. Stukowski, V. V Bulatov, A. Arsenlis, Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 20 (2012) 085007. doi:10.1088/0965-0393/20/8/085007.
- [85] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 18 (2010). doi:10.1088/0965-0393/18/1/015012.
- [86] G. Voronoi, Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques, *J. Für Die Reine Und Angew. Math.* (1908) 198–211.
- [87] C.H. Rycroft, VORO ++ : A three-dimensional Voronoi cell library in C ++, *Chaos.* 19 (2009) 041111. doi:10.1063/1.3215722.
- [88] D. Farkas, M. Willemann, B. Hyde, Atomistic Mechanisms of Fatigue in Nanocrystalline Metals, *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005) 165502. doi:10.1103/PhysRevLett.94.165502.
- [89] G. Jung, Z. Qin, M.J. Buehler, Molecular mechanics of polycrystalline graphene with enhanced fracture toughness, *Extrem. Mech. Lett.* 2 (2015) 52–59. doi:10.1016/j.eml.2015.01.007.
- [90] S. Cranford, M.J. Buehler, Coarse-Graining Parameterization and Multiscale Simulation of Hierarchical Systems. Part I: Theory and Model Formulation, *Multiscale Model. From*

- Atoms to Devices. (2010) 13–34.
- [91] J.A. Zimmerman, E.B. Webb, J.J. Hoyt, R.E. Jones, P.A. Klein, D.J. Bammann, Calculation of stress in atomistic simulation, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 12 (2004). doi:10.1088/0965-0393/12/4/S03.
- [92] R.E. Jones, J.A. Zimmerman, J. Oswald, T. Belytschko, An atomistic J-integral at finite temperature based on Hardy estimates of continuum fields, *J. Phys. Condens. MATTER.* 23 (2011) 1–12. doi:10.1088/0953-8984/23/1/015002.
- [93] A.A. Griffith, The Phenomena of Rupture and Flow in Solids, *Philos. Trans. Ser. A.*, 221 (1920) 163–198.
- [94] Y. Yeh, C. Hwu, A modified molecular-continuum model for estimating the strength and fracture toughness of graphene and carbon nanotube, *Eng. Fract. Mech.* 176 (2017) 326–342.
- [95] Y. Zhang, S. Jiang, X. Zhu, Y. Zhao, A molecular dynamics study of intercrystalline crack propagation in nano-nickel bicrystal films with (010) twist boundary, *Eng. Fract. Mech.* 168 (2016) 147–159. doi:10.1016/j.engfracmech.2016.10.008.
- [96] L. Brochard, I.G. Tejada, K. Sab, From yield to fracture, failure initiation captured by molecular simulation, *J. Mech. Phys. Solids.* 95 (2016) 632–646. doi:10.1016/j.jmps.2016.05.005.
- [97] X.H. Zeng, A. Hartmaier, Modeling size effects on fracture toughness by dislocation dynamics, *Acta Mater.* 58 (2010) 301–310. doi:10.1016/j.actamat.2009.09.005.
- [98] W. Wu, Z. Yao, Molecular dynamics simulation of stress distribution and microstructure evolution ahead of a growing crack in single crystal nickel, *Theor. Appl. Fract. Mech.* 62 (2012) 67–75. doi:10.1016/j.tafmec.2013.01.008.
- [99] R.E. Jones, J.A. Zimmerman, The construction and application of an atomistic J-integral via Hardy estimates of continuum fields, *J. Mech. Phys. Solids.* 58 (2010) 1318–1337. doi:10.1016/j.jmps.2010.06.001.
- [100] Y. Jin, F.G. Yuan, Atomistic simulations of J-integral in 2D graphene nanosystems., *J. Nanosci. Nanotechnol.* 5 (2005) 2099–2107. doi:10.1166/jnn.2005.414.
- [101] M.A. Haque, M.T.A. Saif, Mechanical behavior of 30 – 50 nm thick aluminum films under uniaxial tension, *Scr. Mater.* 47 (2002) 863–867.
- [102] C.T. Sun, Z.-H. Jin, *Fracture Mechanics* Fracture Mechanics, Elsevier Inc., 2012.

doi:<https://doi.org/10.1016/C2009-0-63512-1>.

- [103] J. Skogsrud, C. Thaulow, Application of CTOD in atomistic modeling of fracture, *Eng. Fract. Mech.* 150 (2015) 153–160. doi:10.1016/j.engfracmech.2015.08.043.
- [104] M. Karimi, T. Roarty, T. Kaplan, Molecular dynamics simulations of crack propagation in Ni with defects, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 14 (2006) 1409–1420. doi:10.1088/0965-0393/14/8/008.
- [105] H. Kikuchi, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, P.S. Branicio, F. Shimojo, H. Kikuchi, Brittle dynamic fracture of crystalline cubic silicon carbide (3C-SiC) via molecular dynamics simulation, *J. Appl. Phys.* 98 (2005) 1–4. doi:10.1063/1.2135896.
- [106] J.G. Swadener, M.I. Baskes, M. Nastasi, Molecular Dynamics Simulation of Brittle Fracture in Silicon, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002). doi:10.1103/PhysRevLett.89.085503.
- [107] X.R. Zhuo, J.H. Kim, H.G. Beom, R -curve Evaluation of Copper and Nickel Single Crystals Using Atomistic Simulations, *Crystals.* 8 (2018) 1–10. doi:10.3390/cryst8120441.
- [108] J. Skogsrud, C. Thaulow, Application of CTOD in atomistic modeling of fracture, *Eng. Fract. Mech.* 150 (2015) 153–160. doi:10.1016/j.engfracmech.2015.08.043.
- [109] J. Skogsrud, C. Thaulow, Effect of crystallographic orientation on nanomechanical modelling of an iron single crystal cracked cantilever beam, *Mater. Sci. Eng. A.* 685 (2017) 274–283. doi:10.1016/j.msea.2016.12.060.