

Simulación atomística de la fractura dinámica en un material frágil

J. Aldaco and M. Hinojosa

Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad Autónoma de Nuevo León,
Av. Universidad s/n, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, Apartado Postal 076 F, NL 66450, México,
e-mail: jaldaco@gama.fime.uanl.mx; hinojosa@gama.fime.uanl.mx

Recibido el 25 de abril de 2012; aceptado el 27 de agosto de 2012

En este trabajo se realizaron simulaciones de dinámica molecular (DM) de un modelo de tensión uniaxial bajo tasas de deformación ($\dot{\epsilon} \approx 3.9 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$) que permitieron la generación y la caracterización de la fractura dinámica en un nanomaterial frágil ideal (silicio) preagrietado. Estas simulaciones generaron la propagación de la grieta a una velocidad máxima promedio calculada de $\approx 2 \text{ km/s}$, con características similares a las observadas en experimentos a escala macroscópica, en otras simulaciones (y en la teoría). Entre estas similitudes estuvieron la propagación frágil de la grieta en los planos de clivaje (110) y (111), la influencia de los componentes tensoriales del esfuerzo en la trayectoria de la grieta, los valores promedio e instantáneos de la velocidad de la grieta y la morfología de las piezas simuladas; esta última similitud cualitativa con las superficies de fractura obtenidas en experimentos a escala macroscópica evoca el concepto de autoafinidad de las superficies.

Descriptores: Simulaciones por dinámica molecular; fractura dinámica; nano material; autoafinidad; superficies de fractura.

In this work molecular dynamics simulations (MD) of a model of uniaxial tension at were made rates of deformation ($\dot{\epsilon} \approx 3.9 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$), that allowed the generation and the characterization of the dynamic fracture in a previously cracked ideal brittle nanomaterial (silicon). These simulations generated crack propagation at an average velocity of $\approx 2 \text{ km/s}$ with characteristics similar to those observed in experiments at the macroscopic scale, in other simulations (and theory). Some of these similarities were the brittle propagation in the cleavage planes (110) and (111), the influence of the stress tensor in the crack path, average and instantaneous values of the crack speed and the morphology of the simulated samples; this last qualitative similarity with the fracture surfaces obtained in experiments on a macroscopic scale evokes the concept of self-affinity of the surfaces.

Keywords: Molecular dynamics simulations; dynamic fracture; nanomaterial; self-affinity; fracture surfaces.

PACS: 02.70.Ns; 62.25.Mn

1. Introducción

Los materiales que se utilizan en estructuras de uso ingenieril comúnmente contienen grietas, sin embargo, en la mayoría de los casos éstas resultan inofensivas y no evolucionan a la fractura. Pero cuando esas grietas se localizan en regiones donde pueden presentarse esfuerzos elevados, entonces sí deben verse como potenciales iniciadores de la fractura. Al establecerse los esfuerzos críticos para el inicio y la propagación de la grieta se puede presentar una alta ($> 1000 \text{ m/s}$) o baja ($< 1 \text{ mm/año}$) velocidad de propagación, según las condiciones de fuerza aplicadas (estática, dinámica, carga controlada [1], agarre controlado [1], etcétera) y los factores ambientales (temperatura, ambiente corrosivo, etcétera).

Si bien desde un punto de vista práctico el interés principal se enfoca en determinar si la fractura ocurre o no, también se ha advertido que los análisis dinámicos –aquellos que se realizan durante la propagación rápida de la grieta– tienen aplicaciones prácticas, por ejemplo, son el fundamento teórico en los métodos de diseño para detener una grieta [2]; igualmente, son importantes para el estudio de terremotos, en evaluaciones de daño en accidentes y en operaciones mineras, entre otros [1-3].

Aunque se han realizado muchos avances teóricos y experimentales en la fractura dinámica [4], aún persisten fenómenos que no están completamente entendidos [5-8], entre éstos están: la existencia de una aparente velocidad terminal de la

grieta muy inferior a la velocidad de onda de Rayleigh en vidrio y en algunos otros materiales muy frágiles [2,5,6,9,10], la inestabilidad dinámica de la punta de la grieta [2,5-14] la bifurcación simétrica de una grieta que originalmente se propaga rápidamente de forma recta en un campo tensil, la influencia del calor generado durante la fractura rápida en el proceso de separación o en la distribución de esfuerzos [6], así como la modelación atómica de clivaje dinámico [4]. Por otro lado, los fenómenos asociados a la nucleación y propagación de grietas en la llamada zona de proceso siguen planteando diversas interrogantes que pueden ser abordadas mediante simulaciones a nivel atómico [1].

Las primeras simulaciones de dinámica molecular de la fractura datan de hace 35 años [15], a lo largo de estos años se han desarrollado siguiendo dos distintos enfoques [8]: Identificar al nivel más simple ciertos mecanismos genéricos de la fractura o determinar resultados de la fractura en el nivel más alto posible de precisión para un material en particular.

En el presente trabajo tomamos la segunda orientación para analizar las simulaciones de dinámica molecular de la fractura de silicio monocristalino preagrietado, sometido a cargas de tensión uniaxial (modo I); pero sin dejar de considerar aquellas simulaciones no relacionadas con silicio [7,8,11,14-22] que incluyen avances importantes en las condiciones de frontera e iniciales, metodologías, algoritmos, resultados y tendencias en la simulación de la fractura de materiales.

Entre las simulaciones para el silicio destacan la de Holland *et al.* [23], ellos manejaron un potencial Stillinger-Weber (SW) [24] para verificar algunos alcances del modelo de red [25]; también la de Pérez *et al.* [26], quienes basados en un pseudopotencial de energía total [27] estudiaron la anisotropía del clivaje; igualmente las de Bernstein & Hess [28,29], en éstas ensayaron diferentes potenciales interatómicos con lo cual mostraron la relevancia de los mismos en la propagación de la grieta; sin olvidar la de Swadener *et al.* [30], ellos analizaron la propagación de la grieta en función del tamaño de las muestras y de la tasa de liberación de energía G ; y la de Buehler *et al.* [31], quienes detectaron que los cambios en la estructura se manifestaban en la velocidad instantánea de la punta de la grieta.

Los resultados de estas simulaciones muestran concordancias con los productos de algunos experimentos [12,32,33] y con ciertos postulados teóricos [1,4,10,34], por ejemplo: la iniciación de la fractura obedece la condición de Griffith [29], la grieta se propaga en los planos de clivaje que tienen bajas energías superficiales [26,28,30], la propagación inicial recta de la grieta genera superficies de fractura lisas [29,30]; en otros casos sólo se observaron similitudes con los resultados de ciertos experimentos, por ejemplo: el comportamiento $v(G)$ [30], el máximo de la velocidad [30], la anisotropía del clivaje [26] y la aparición de una inestabilidad en la velocidad [31].

Esas investigaciones nos dieron el respaldo técnico, tal y como se explica en la siguiente sección, para elaborar el presente trabajo referente a la fractura dinámica, y también nos sirvieron para comparar nuestros resultados. En esta investigación se simuló por dinámica molecular un modelo de tensión en un nanomaterial frágil (silicio) ideal que generó fractura. La idea principal era observar si en las fracturas generadas se apreciarían rasgos detectados en muestras de dimensiones mayores, lo que indicaría que aún en estas escalas nanométricas se tendrían características de fractales autoafines [35]. Las dudas en cuanto a las similitudes que podrían encontrarse surgían porque las escalas de longitud y de tiempo entre las simulaciones y los experimentos son muy diferentes [7,20,36], además las propiedades mecánicas de los materiales en pequeñas dimensiones pueden ser muy diferentes de las que presentan los materiales macroscópicos, aunque tengan la misma composición [37].

2. Modelo

El punto de partida para las simulaciones fue la generación de coordenadas para los núcleos de los átomos de silicio, esto se hizo a través de la réplica tridimensional de una celda ideal unitaria cúbica centrada en las caras (fcc) tipo diamante. Luego, a ese sistema inicial de coordenadas se le giró en 3 maneras diferentes, con lo que se tuvieron los siguientes sistemas: (110)[1 $\bar{1}$ 0], (100)[0 $\bar{1}$ 0] –plano que no es de clivaje para el silicio– [38] y (111)[10 $\bar{1}$] –plano de clivaje para el silicio– [23]; esto con la finalidad de analizar diferentes escenarios en la propagación de la grieta. Las muestras correspondien-

tes tuvieron las dimensiones de longitud (L) en $x \times$ altura en $y \times$ espesor en $z = 69 \times 54 \times 22 \text{ \AA}^3$, $65 \times 55 \times 22 \text{ \AA}^3$, y $69 \times 57 \times 20 \text{ \AA}^3$, respectivamente.

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

Para modelar el comportamiento físico de las muestras se implementó un potencial interatómico SW [24] (éste captura bien la física no lineal involucrada en el calentamiento y la fusión [36]), y mediante simulaciones de DM canónicas desarrolladas durante 20,000 pasos de tiempo (20.4 ps)ⁱ se asignaron 2 temperaturas iniciales (100 & 300 K) a cada una de las 3 muestras.

La simulación de la deformación de las muestras se hizo recurriendo nuevamente al potencial interatómico SW, pero también se utilizaron otros dos potenciales empíricos: MSW1 [36] (éste es un potencial tipo SW que presenta mayor estabilidad de los tetraedros que conforman la estructura cristalina fcc tipo diamante, lo cual aumenta la rigidez de las muestras) y MSW2 [39] (éste también es un potencial tipo SW que genera un mejor acuerdo de los valores del módulo volumétrico (B) y de las relaciones de dispersión de fonones obtenidos por simulaciones con aquellos observados en los experimentos; lo que genera una mejor descripción de la dinámica de la red cristalina), con la idea de que alguno generara características frágiles. Las ecuaciones de movimiento atómico que permitieron modelar la expansión homogénea [19] de las muestras en la dirección y , sin control de temperatura, fueron las propuestas por Zhou *et al.* [8]:

$$\dot{r} = v + \dot{\epsilon}y\hat{y} \quad (1)$$

$$\dot{v} = \frac{F}{m} - \dot{\epsilon}v_y\hat{y} - \zeta v \quad (2)$$

donde $\dot{\epsilon}$ es la velocidad de deformación y ζ es un coeficiente de fricción [40], o coeficiente de amortiguamiento viscoso [20], que se aplica a una región (1 celda) en la periferia en x y en y de las muestras con el objetivo de absorber las reflexiones de fonones [40]. En la dirección z se implementó una condición periódica, con esto último se tuvo una situación de deformación planaⁱⁱ.

Para $\dot{\epsilon}$ se utilizó un valor de 0.39 Ts^{-1} [23], en tanto que para ζ los valores se incrementaron desde cero en la interfase donde comenzaba la región de amortiguamiento hasta los máximos de 0 Ts^{-1} , 0.0195 Ts^{-1} , 0.195 Ts^{-1} y 97.5 Ts^{-1} (según el caso simulado) donde terminaba la región de amortiguamiento [40].

La implementación de los anteriores elementos, aunados a los componentes clásicos de la dinámica molecular (entre éstos el algoritmo Gear predictor-corrector para integrar las

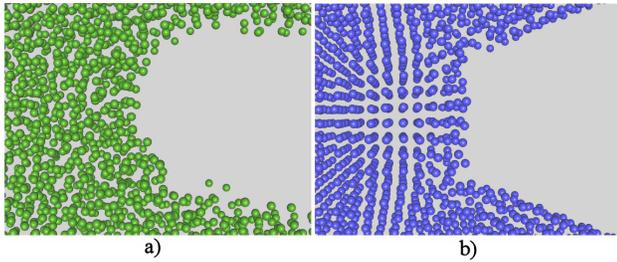


FIGURA 1. Fractura embotada: (a) con MSW2, en (100), a los 1000 p.t. y (b) con SW, en (110), a los 2500 p.t.

ecuaciones de movimiento) [41], en programas realizados en *Fortran* permitieron la simulación de la deformación y de la consecuente fractura de las muestrasⁱⁱⁱ.

Durante las simulaciones se registraron, cada 500 pasos de tiempo (p.t.), los datos de posición, energía, deformación y esfuerzos a nivel atómico [42]. Luego, a esas 3 últimas características se les aplicó una discretización para asignarles un color [8] acorde a la magnitud de sus valores, esto con el propósito de obtener una mejor visualización de los fenómenos^{iv}. Adicionalmente, se calculó la velocidad promedio de la grieta (v_{prom}), definida como la relación entre el camino de la grieta, $L - l_m$, y la duración del proceso de fractura [44]; así como la velocidad instantánea de la punta de la grieta, determinada como el cambio en la posición x de

la punta de la grieta dividida por el intervalo de tiempo de recopilación de datos [8].

3. Resultados y discusión

Al comparar los resultados obtenidos –principalmente, la morfología de las piezas simuladas– con aquellos provenientes de experimentos a escala macroscópica, de otras simulaciones y de la teoría del continuo se observaron algunas discrepancias pero también varias coincidencias, éstas a pesar de que se tenían ciertos hechos discutibles [3,36], por ejemplo: se utilizaron potenciales interatómicos empíricos, con altas tasas de deformación y efímeros tiempos de propagación de la fractura.

El análisis de la propagación de la grieta mostró el embotamiento de la fractura al utilizar los potenciales MSW2 y SW –similar a Holland *et. al* [36]–, con un comportamiento dúctil (Figs. 1a y 1b, respectivamente), a pesar de que se simularon los planos de clivaje. La muestra SW mantuvo gran parte del comportamiento cristalino, pero la muestra MSW2 exhibió la pérdida total de la cristalinidad.

Al utilizar el potencial MSW1 sí se manifestó la propagación de la grieta, sin embargo, ésta dependió del plano de propagación, de la temperatura inicial de la muestra y del co-

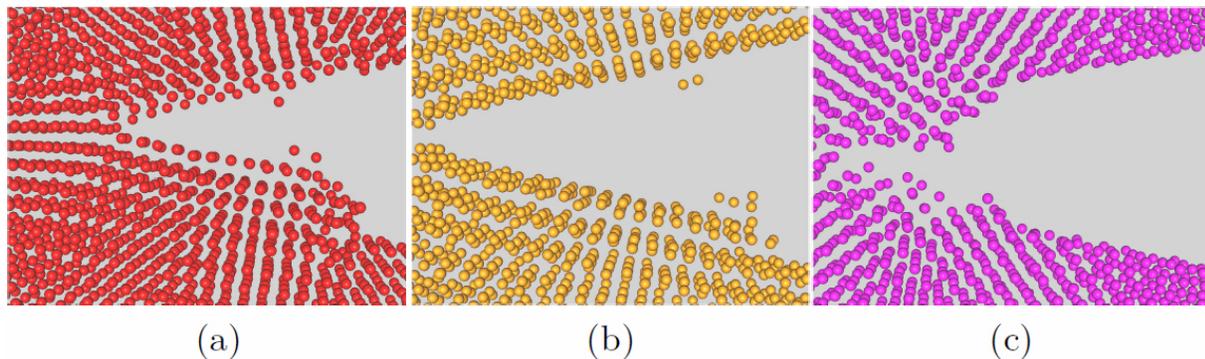


FIGURA 2. Fractura en muestras MSW1 a 100 K iniciales y 0.195 Ts^{-1} máximo: (a) en (110) a los 4000 p.t., (b) en (111) a los 3500 p.t., (c) en (100) a los 3000 p.t.

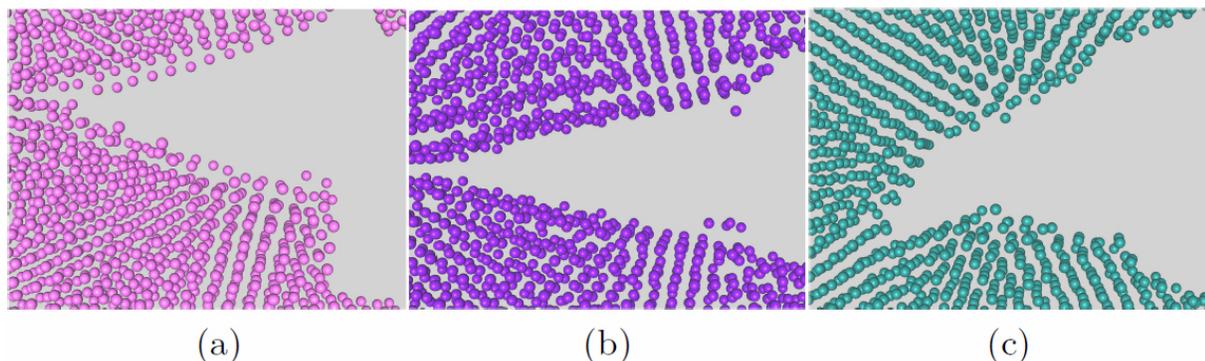


FIGURA 3. Fractura en muestras MSW1 a 300 K iniciales: (a) en (110) a los 4500 p.t. y 0 Ts^{-1} máximo, (b) en (111) a los 3500 p.t. y 0.195 Ts^{-1} máximo, (c) en (100) a los 5000 p.t. y 0.195 Ts^{-1} máximo.

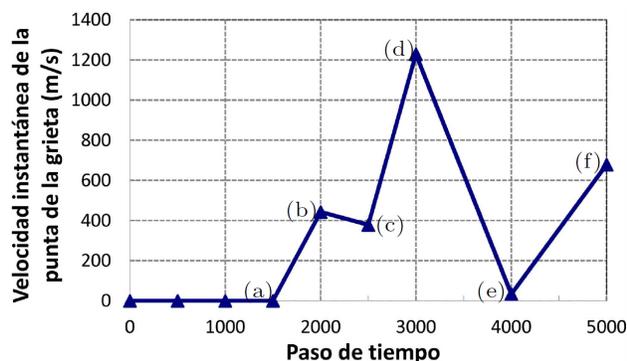


FIGURA 4. Velocidad instantánea de la punta de la grieta de una muestra MSW1 a 100 K iniciales en (100).

eficiente de amortiguamiento viscoso. Como podría anticiparse [23,26,30,44-46], en los planos de clivaje se presentó la fractura frágil que generó superficies lisas (Figs. 2a, 2b; 3a y 3b); en tanto que en el plano de no clivaje la fractura presentó pequeñas oscilaciones en el camino principal [36] (Figs. 2c y 3c), situación similar a la observada en una simulación de Holland y Marder [36]. Las superficies de las fracturas frágiles generadas en las simulaciones mostraron una similitud cualitativa con aquellas superficies reportadas como atómicamente planas en otras simulaciones [29,30] y con las encontradas en experimentos para bajas energías de fractura en probetas de tamaño milimétrico a temperatura ambiente

TABLA I. v_{prom} en (111), (100) y (110), obtenida en muestras MSW1 a 100 K y 300 K iniciales. Los valores reportados son el promedio de las v_{prom} obtenidas en las simulaciones donde sí se propagó la grieta. Las velocidades de Rayleigh c_R en los planos (111) y (110) son: 4.68 km/s [30,31] y 4.5 km/s [47], respectivamente.

	(111)	(100)	(110)
v_{prom} (m/s)			
en las muestras a 100 K iniciales:	1902	517	961
v_{prom} (m/s)			
en las muestras a 300 K iniciales:	1779	532	799

[33,44,46], esto evoca el concepto de autoafinidad de las superficies.

En el caso de la fractura en (100) a 100 K iniciales (Fig. 2c) se analizó la velocidad instantánea de la punta de la grieta, observando un comportamiento inestable y oscilante –esto último era de presumirse, pues este plano no es de fácil propagación–. Y, en diferentes pasos de tiempo –incisos (a), (b), (c), (d), (e) y (f) en la Fig. 4– se siguió la morfología correspondiente (Fig.5), notando el reflejo del zigzagueo en la superficie de fractura –un estudio semejante a éste lo realizaron Buehler *et al.* [31]–.

Por otra parte, las velocidades promedio (v_{prom}) de propagación de la fractura en las muestras MSW1 a 100 K iniciales y en las muestras a 300 K iniciales mostraron valores

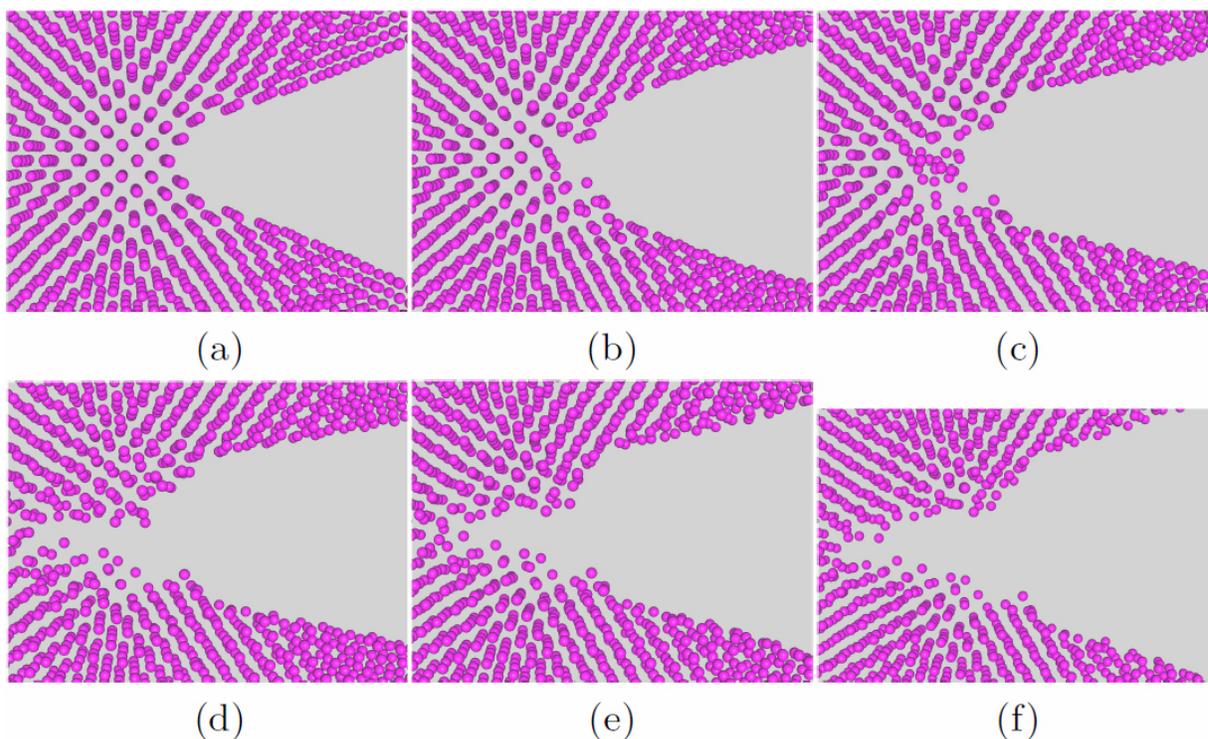


FIGURA 5. Evolución de la punta de la grieta de una muestra MSW1 en (100), durante diferentes pasos de tiempo: (a) 1500, (b) 2000, (c) 2500, (d) 3000, (e) 4000 y (f) 5000.

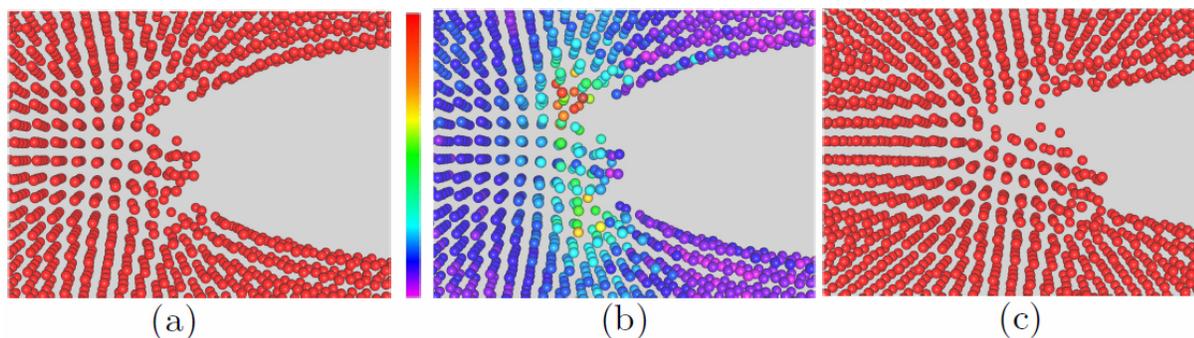


FIGURA 6. Fractura en (110) en muestras MSW1 a 100 K iniciales y 0.195 Ts^{-1} máximo, en diferentes p.t.: (a) 2000, (b) 2000 –los átomos exhiben el intervalo de σ_1 – y (c) 2500.

y tendencias similares (Tabla I). Los resultados concuerdan cualitativamente con algunos obtenidos experimentalmente en materiales cristalinos, pues en estos últimos, la grieta crece en los planos de clivaje a las velocidades límites [34 pags. 190-193].

Además, en la muestra representada en la Fig. 2(a) se efectuó un análisis de los esfuerzos *atómicos*; esto se hizo para tener un parámetro cuantitativo que permitiera elucidar el camino de propagación, pues a los 2000 p.t. se presentaron dos potenciales caminos simétricos para la propagación de la fractura (Fig. 6a). En la Fig. 6b se reproduce el espectro de los esfuerzos principales, notando que los máximos valores se presentan en el probable camino superior. Lo que nos conduce a postular en base al criterio del esfuerzo máximo, el cual se maneja en grietas dinámicas [10], que la fractura se debiera propagar por el camino superior, lo que efectivamente sucede a los 2500 pasos de tiempo (Fig. 6c).

4. Conclusión

El modelo de dinámica molecular simulado en el presente trabajo generó la propagación de la grieta con algunas características similares a las establecidas en la teoría [10], a lo observado en algunos experimentos [33,34,44,46] y en otras simulaciones [20,23,26,30,36].

De los potenciales interatómicos utilizados (SW, MSW2 y MSW1) en el modelo, los dos primeros resultaron inadecuados para simular la fractura del silicio, pues causaban ductilidad que impedía la propagación de la grieta; el MSW1 sí generó la fractura con características morfológicas lisas de las piezas simuladas en los planos de clivaje, dichas superficies resultaron similares cualitativamente a las detectadas en experimentos macroscópicos [12,33]; lo que evoca el concepto de autoafinidad de las superficies [35].

Así mismo, las mayores velocidades promedio de propagación de las grietas se obtuvieron en los planos de clivaje, lo que concuerda cualitativamente con lo percibido en resultados experimentales. Las velocidades instantáneas de las puntas de las grietas en los planos de no clivaje tuvieron un comportamiento inestable: acelerándose y desacelerándose en forma oscilante, este escenario se manifestó en las superficies de fractura con una cierta rugosidad.

Los máximos valores de los esfuerzos principales atómicos permitieron sugerir el camino de propagación de la grieta.

Los resultados aquí mostrados nos permitirán avanzar en la elaboración de un modelo multiescalar de la fractura en materiales heterogéneos, para dar continuidad a este trabajo nos proponemos simular un material amorfo y a la par incrementar las dimensiones de las muestras en trabajos futuros.

- i. 1 paso de tiempo = 1.02 fs, este valor es similar al manejado por Bernstein *et al.* [28,29] (1 fs); al utilizado por Buehler *et al.* [31] (1.5 fs); y al empleado por Holland *et al.* [23].
 - ii. Esta limitante puede influir en la posibilidad de la nucleación de dislocaciones [31].
 - iii. Se utilizaron 3,500 pasos de tiempo (3.57 ps) para la propagación de la fractura en el plano (111), en tanto que en (110) y (100) se manejaron 7,000 pasos de tiempo (7.14 ps).
 - iv. Se utilizó XMakemol [43] como herramienta de visualización.
1. K. B. Broberg, *Cracks and Fracture* (Academic Press, San Diego, 1999).

2. E. Sharon and J. Fineberg, *Advanced Engineering Materials* **1** (1999) 119.
3. B. N. Cox, H. Gao, D. Gross, and D. Rittel, *Journal of the Mechanics and Physics of solids* **53** (2005) 565.
4. L. B. Freund *Dynamic Fracture Mechanics* (Cambridge, University Press, Cambridge, UK, second edition, 1998).
5. J. Fineberg, S. P. Gross, M. Marder and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991).
6. M. Marder and Xiangming Liu, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 2417.
7. Farid F. Abraham, D. Brodbeck, R. A. Rafey and W. E. Rudge, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 272.

8. P. Gumbsch, S. J. Zhou and B. L. Holian, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 3445.
9. F. F. Abraham, D. Brodbeck, W. E. Rudge and X. Xu, *J. Mech. Phys. Solids* **45** (1997) 1595.
10. J. Fineberg and M. Marder, *Physics Reports* **313** (1999) 1.
11. F. F. Abraham, *J. Mech. Phys. Solids* **45** (1997) 1461.
12. T. Cramer, A. Wanner and P. Gumbsch, *Phys. Status Solidi (a)* **164** (1997) R5.
13. F. F. Abraham, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **49** (2001) 2095.
14. F. Abraham. Unstable crack motion is predictable. In D. P. Landau, S. P. Lewis, and H. B. Schüttler, editors, *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVIII* vol. 105 (Springer- Verlag Berlin Heidelberg, 2007). pages 39-45.
15. W. T. Ashurst and W. G. Hoover, *Phys. Rev. B* **14** (1976) 1465.
16. K. S. Cheung and Sidney Yip, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 2804.
17. F. F. Abraham, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 869.
18. F. F. Abraham, N. Bernstein, J. Q. Broughton, and D. Hess, *MRS Bull.* **25** (2000) 27.
19. B. Lee Holian and R. Ravelo, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 11275.
20. S. J. Zhou, P. S. Lomdahl, R. Thomson and B. L. Holian, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 2318.
21. M. J. Buehler, F. F. Abraham, and Huajian Gao, *Nature* **426** (2003) 426.
22. M. J. Buehler, F. F. Abraham, and H. Gao, *Stress and energy flow field near a rapidly propagating mode i crack* (In Springer Lecture Notes in Computational, 2004). page 143.
23. Dominic Holland and M. Marder, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 746.
24. F. H. Stillinger and T. A. Weber, *Phys. Rev. B* **31** (1985) 5262.
25. M. Marder and S. Gross, *J. Mech. Phys.* **43** (1995) 1.
26. Rubén Pérez and Peter Gumbsch, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 5347.
27. J. S. Lin, A. Qteish, M. C. Payne, and V. Heine, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 4174.
28. N. Bernstein and D. Hess, *Multiscale simulations of brittle fracture and the quantum-mechanical nature of bonding in silicon*. In L. P. Kubin, R. L. Selinger, J. L. Bassani, and K. Cho, editors, (Multiscale Modeling of Materials-2000, volume 653, Materials Research Society, 2001). pages Z2.7.1-Z2.7.6.
29. N. Bernstein and D. W. Hess, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 025501-1.
30. J. G. Swadener, M. I. Baskes, and M. Nastasi, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 0855031.
31. M. J. Buehler, H. Tang, A. C. T. van Duin and W. A. Goddard III, *Phys. Review Letters* **99** (2007) 165502-1.
32. A. George and G. Michot, *Mater. Sci. and Eng. A* **164** (1993) 118.
33. J. A. Hauch, D. Holland, M. P. Marder and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 3823.
34. K. Ravi-Chandar. *Dynamic Fracture*. Elsevier Ltd, The Boulevard, Langford Lane, Kidlington, Oxford OX5 1GB, UK, 2004).
35. E. Bouchaud, *J. Phys. Condens. Matter* **9** (1997) 4319.
36. D. Holland and M. Marder, *Adv. Mater.* **11** (1999) 793.
37. R. W. Cahn, *The coming of materials science* vol. 5. (In Pergamon Materials Series, 2001). Elsevier Science Ltd.
38. J. Q. Broughton, F. F. Abraham, N. Bernstein and E. Kaxiras, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 2391.
39. Zi Jian, Zhang Kaiming and Xie Xide, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 12915.
40. Jerry Z. Yang and Xiantao Li, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 1.
41. M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press 1987).
42. J. A. Zimmerman, *Continuum And Atomistic Modeling Of Dislocation Nucleation At Crystal Surface Ledges* (PhD thesis, Stanford University, 1999).
43. M. P. Hodges, *XMakeMol: A program for visualizing atomic and molecular*, (version 5, 2001).
44. T. Cramer, A. Wanner and P. Gumbsch, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 788.
45. M. Marder, *Europhysics Letters* **66** (2004) 364.
46. B. Lawn, *Fracture in Brittle Solids* (Cambridge University Press, second edition, 1993).
47. T. Cramer, A. Wanner and P. Gumbsch, *Z. Metallkd* **90** (1999) 675.