**Efecto del tamaño de grano en el comportamiento mecánico de un nano cristal de Aluminio**

**Miguel Pacheco-Agámez1, Valery Lancheros-Suarez 1, Wilmer Velilla-Díaz 2**

1Grupo ICT, Departamento de Ingeniería mecánica, Universidad de Córdoba, Colombia. Email: [mpacheoagamez@correo.unicodoba.edu.co](mailto:mpacheoagamez@correo.unicodoba.edu.co); [vlancheros@correo.unicordoba.edu.co](mailto:vlancheros@correo.unicordoba.edu.co)

2Instituto de Diseño y Métodos Industriales, Universidad Austral, Chile. Email: [wilmer.velilla@uach.cl](mailto:wilmer.velilla@uach.cl)

**Resumen**

Los materiales nano cristalinos (tamaño de grano <100nm) exhiben propiedades mecánicas de mayor magnitud que los materiales con tamaño de grano grueso. La resistencia última a la tensión de un nano cristal de Aluminio (Al) sin defectos es del orden de 7 GPa. En esta investigación, se estudia la influencia del tamaño de grano en la distribución de esfuerzos locales para monocristales fisurados sometidos a cargas monotónicas bajo deformación controlada en modo de carga I. El método multiescala Átomo al continuo (ATC) es implementado usando cantidades atómicas provenientes de resultados de simulaciones de dinámica molecular (DM) y permite la construcción de la simulación por el método de elementos finitos (MEF) para estimar el campo de esfuerzos del material. El campo de esfuerzos locales y la resistencia última se estiman usando la formulación de Hardy y ATC para monocristales de Al. Los resultados para los diferentes tamaños de grano estudiados muestran convergencia con los valores reportados en la literatura. Adicionalmente, se observa que el valor de la resistencia última es independiente del tamaño de grano en los monocristales estudiados.

**Palabras clave:** simulación atomística, mecánica del medio continuo, método multiescala, campo de esfuerzo.

**Abstract**

Nanocrystalline materials (grain size < 100 nm) showed higher mechanical properties than coarse grain materials. Such as the ultimate tensile strength (UTS) of Nanocrystalline Aluminum (Al), which was almost 7 GPa in a perfect single-crystal. In this research, the influence of grain size on the local stress distribution during crack propagation through a concurrent multi-scale method that related the Molecular dynamics (MD) approach and Finite Element Method (FEM) was studied. The atomic-scale quantities were obtained from MD simulations of a single-crystal Al loaded under controlled deformation in mode I. The embedded-atom method (EAM) potential was used in the atomistic sub-domain and a multi-scale model, Atom-to-Continuum (ATC), was implemented to estimate the stress field using a localization function in the FE sub-domain. Local stress fields and UTSs were estimated using Hardy's formulation and ATC for a single crystal of Al. Then, UTSs for different grain sizes of single crystals were evaluated using ATC. The simulation results were according to the reported values in the literature. Additionally, UTSs showed grain size independence for single-crystal samples.

**Keywords:** atomistic simulation, continuum mechanics, multiscale method, stress field.

# Introducción

El desarrollo de modelos estocásticos, la dinámica molecular y el aumento de las capacidades de cómputo han hecho posible el estudio del comportamiento mecánico de materiales, como el Aluminio, en su escala fundamental [1]–[5]. La estimación de propiedades mecánicas excepcionales de materiales a escala nanométrica ha despertado un gran interés en este campo de estudio a lo largo de diferentes investigaciones [6], [7]. No obstante, por su potencial aplicación en industrias de gran envergadura como la aeronáutica, la automotriz, la medicina y en general las tecnologías asociadas a la industria 4.0, el aluminio requiere gran atención a la hora de su estudio para estimar su comportamiento mecánico [8].

Las simulaciones de dinámica molecular han permitido el estudio de las propiedades y comportamiento mecánico del Aluminio con tamaño de grano ultrafino bajo diferentes condiciones de trabajo. Chandra et al.[9] estudiaron la propagación de una fisura en un nano cristal de Aluminio sometido a una deformación controlada en modo I. La investigación se realizó en nano cristales con presencia y ausencia de defectos (vacíos atomísticos) demostrando que la velocidad de propagación es menor en los cristales con mayor concentración de vacíos. Xu et al. [7] estudiaron el efecto del tamaño de grano en el comportamiento mecánico de monocristales y policristales de Aluminio. La investigación mostró como no se cumple la relación de Hall-Petch para tamaños de grano entre . Velilla et al. [10] estudiaron el efecto de la frontera de grano de la tenacidad a la fractura del Aluminio hallando que esta es 5 veces mayor en bicristales que en monocristales. Por otro lado en [11], estudiaron el efecto del tamaño de la fisura en la fractura del monocristales y bicristales de Aluminio, encontrando una longitud característica en la que disminuye la tenacidad a la fractura y que la frontera de grano en el bicristal resulta beneficiosa para la resistencia a la fractura del material.

Como se citó anteriormente, múltiples investigadores han estudiado el comportamiento de materiales y en particular del aluminio a través de simulaciones de dinámica molecular. Este método describe de forma correcta fenómenos como son la nucleación de defectos, la propagación de fisuras, vacíos atómicos y demás mecanismos de falla en escala nanométrica. Sin embargo, la dinámica molecular no permite simular problemas macroscópicos propios de la mecánica del medio continúo debido a la demanda en recurso computacional por la cantidad de grados de libertad y las ineficiencias computacionales. A diferencia de este, el método de elementos finitos (MEF) permite calcular los campos de desplazamientos, tensores de esfuerzos y comportamiento del material a través de modelos constitutivos del medio continuo en escala macroscópica. No obstante, defectos y fenómenos no lineales configuran un problema difícil de abordar para este método [12]. Luego de reconocer las limitaciones y bondades de estos dos poderosos métodos, investigadores han desarrollado diferentes técnicas que combinan las simulaciones de MD y las de elementos finitos (EF) en una [13]–[15]. El método cuasi-continúo propuesto por Tadmor ed al. [16] es uno de los métodos multiescala más influyentes. Este método combina EF con un refinamiento de malla zonificado para los puntos dónde están los defectos y que incorpora las interacciones atómicas basadas en el cálculo de campos de deformación local en los cristales del material. El método cuasi-continúo ha sido usado en el estudio de defectos como dislocaciones [17], el efecto de la rugosidad superficial en la nanoindentación y la profundidad crítica para la emisión de dislocaciones [18] o en problemas de fractura con cargas cíclicas [19]. Por su parte, Saether et al. [20] plantearon el método de acoplamiento estadístico embebido (ESCM) por sus siglas en ingles.

Este método permitió el acoplamiento de los subdominios atomístico y del continuo a través de un promedio estadístico de los desplazamientos atómicos y asociarlos a cada nodo en la región de interfaz, evitando el refinamiento del mallado hasta la escala atómica y la necesidad de condiciones de temperatura a 0 Kelvin. El método ESCM ha sido usado en investigaciones sobre la nucleación de dislocaciones en la punta de fisura de un nano-cristal de Aluminio teniendo en cuenta diferentes orientaciones cristalográficas y un amplio rango de temperatura [21]. Otro método novedoso propuesto por Chen et al [22] es el de acoplamiento concurrente atomístico al continúo (CAC) por sus siglas en ingles. Este método combina una representación del campo continuo con información completamente atomística desde su formulación y el método de elementos finitos modificado que emplea celdas primitivas tridimensionales. El método CAC ha sido implementado para estudiar el efecto de la frontera de grano y su interacción con otros defectos en materiales de enlaces iónicos como es el titanato de estroncio [23]. En la presente investigación, se estima el campo de esfuerzos locales en monocristales de Aluminio fisurados y se estudia el efecto del tamaño de grano en la resistencia última del material usando el método multiescala átomo al continuo (ATC). Los resultados de ATC son comparados con los resultados obtenidos usando el teorema del Virial (VT) y la formulación de Hardy [24].

# Modelo y teoría computacional

## Simulaciones de dinámica molecular

En las simulaciones de dinámica molecular se usó el potencial interatómico del átomo embebido (EAM) propuesto por Mendelev et al. [25] para estudiar metales FCC con defectos, en este caso, el Aluminio. Se estudiaron monocristales con dimensiones , y dónde es el parámetro de red del aluminio que corresponde a . Las longitudes de la fisura son respectivamente . Se implementa una proporción creciente entre y de la fisura. En la **Figura 1** se puede observar el esquema.

Para la simulación se implementaron condiciones de superficie libre en la dirección , mientras en las direcciones y se implementaron condiciones de frontera periodica. El cristal está construido con replicas de la celda FCC en las direcciones . La temperatura del sistema se mantuvo en usando el termostato de Nose/Hoover. Así mismo, se mantuvo el sistema a presión constante a en las direcciones y usando el barostato de Nose/Hoover. Se aplican condiciones de desplazamiento controlada en la dirección a una velocidad de deformación de y un paso de tiempo de .

La simulación se desarrolla a través de 4 etapas descritas en [10]. El código de la simulación fue implementado en Lammps [26]. Los esfuerzos globales fueron estimados con las simulaciones de dinámica molecular usando la formulación para el tensor de esfuerzos del Virial propuesta en [27]. Por otro lado, los esfuerzos locales fueron estimados usando la formulación de Hardy propuesta en [24] y comparados con la formulación de ATC usando el paquete USER-ATC de Lammps.

****

**Figura 1**. Esquema de dimensiones del monocristal y la nano-fisura.

## formulación de cantidades del continuo con ATC

Resse et at. [28] propusieron el método átomo al continuo (ATC), cuya finalidad fue proveer una herramienta para simular y diseñar materiales nanoestructurados. Este método permite simular sistemas en grandes escalas con detalles atómicos [29], [30], el promedio de cantidades atómicas para estimar cantidades de campo descritas en la formulación y las teorías del medio continuo (método de grano grueso o coarse-graining en inglés) [31]–[35] y el acoplamiento de los cálculos de dinámica molecular y elementos finitos [36].

### Esfuerzos locales

El método de grano grueso o coarse-graining consiste en un promedio de cantidades atómicas para estimar campos físicos definidos en las teorías de la mecánica del medio continuo. Es así como, ATC provee una alternativa para el cálculo del campo de esfuerzos locales, en este caso, para una superposición completa de los dos dominios atomístico-continuo. El método multiescala ATC configura una modificación de la formulación original de Hardy, basada en una configuración Euleriana/espacial que permite el cálculo del esfuerzo de Cauchy **.** No obstante, ATC representa en su formulación una configuración Lagrangiana/material, particularmente, predilecta en la mecánica de sólidos y en las teorías del medio continuo. En este caso, debido a su configuración permite el cálculo del primer tensor de esfuerzos de Piola-Kirchoff desarrollado por Zimmerman et al en[33] **y** basado en la formulación de Hardy.

El caso de grano grueso implementa el método de mínimos cuadrados para minimizar la diferencia entre la densidad de masa microscópica y su aproximación basada en la descripción del medio continuo.

|  |
| --- |
| , (1) |

Dónde y representan los nodos y y son las correspondientes bases. La densidad de masa microscópica es definida como sigue:

|  |
| --- |
| , (2) |

Cuya expresión está en términos de cantidades atómicas, dónde es la masa de los átomos y es el operador delta de Dirac. Mientras, y representan los puntos en el campo continuo y las posiciones de los atomos, respectivamente. Tomando la ecuacion (1) y (2) se resuelve:

, (3)

Dónde es la base evaluada en las posiciones atómicas y es la matriz de masa. La densidad de masa en los nodos puede ser obtenida con la proyección de la ecuación (3) como se indica:

, (4)

Un término importante es presentado, que se encargará de la localización de la información atómica en nodos específicos. Una función de localización con . Una vez los nodos obtienen sus valores respectivos, las bases son usadas para interpolar los campos en el continuo.

|  |
| --- |
| , (5)  Un procedimiento similar es requerido para estimar otros campos físicos como la densidad de momento lineal . |

, (6)

Tanto el campo de densidad de masa como el de momento lineal se pueden expresar en la configuración Lagrangiana/material de la siguiente forma:

, (7)

, (8)

Dónde . Tomando la ecuación (6) y la ecuación (4) se usan para derivar una expresión que permita calcular el tensor de esfuerzos de Cauchy:

, (9)

Que al resolver la ecuación (9) se obtiene:

, (10)

Dónde es la fuerza en un átomo debido a , tal que . Para terminar la formulación del tensor de Cauchy es necesario introducir la llamada función de enlace:

, (11)

Dónde ,tal que

, (12)

Finalmente, combinando la ecuación (9), (10) y (12) se obtiene la expresión para el tensor de Cauchy.

, (13)

Dónde la velocidad relativa se define como,

, (14)

Similarmente, se obtiene la expresión en configuración Lagrangiana/material que deriva en el primer tensor de Piola-Kirchhoff,

, (15)

Para el cálculo de esfuerzos se usó el paquete de Lammps USER-ATC considerando el nano cristal, únicamente, en el instante antes de la fractura. Esto permite simular un estado cuasi-estático del problema de deformación del nano cristal y obtener el valor de esfuerzo máximo de tensión del cristal antes de la fractura. Para esto, el cristal es discretizado con una malla hexaédrica igualmente espaciada en las diferentes direcciones. Adicionalmente, se establece una región de “átomos fantasmas” con una longitud de 2 veces el parámetro de red en cada extremo de la dirección con el fin de evitar el efecto de la superficie libre en el cálculo y que detalla Zimmerman et al. en [31]. Posteriormente, para los esfuerzos es necesario implementar una función de localización Kernel-polinomial de volumen esférico que permitirá establecer un punto material sobre el que se harán los cálculos basados en los átomos que estén dentro del radio de acción de la función. En este sentido, se establece un radio sobre el que se hará el promedio de cantidades atómicas y que contempla el criterio de convergencia hallado por Reese et al en [32]. Para la solución de la integración de la función de enlace se usa la cuadratura de Gauss de 10 puntos. Estos valores son asignados en la malla de elementos finitos a los nodos e interpolados a través de las funciones de forma bilineales características de los elementos hexaédricos [37].

Teniendo en cuenta que el método ATC calcula el tensor de esfuerzos en configuración Lagrangiana/material, es decir el primer esfuerzo de Piola-Kirchoff, es necesario aplicar la transformada de este para calcular el tensor de Cauchy tal como lo indica Zimmerman et al en [33] para compararlo con los resultados de la formulación de Hardy. Sin embargo, veremos que el tensor de Piola-Kirchoff es consistente con el tensor de Cauchy debido a que la contribución de la energía cinética es despreciable comparada con la energía potencial para sistemas en condiciones de temperatura menor a de la temperatura de fusión tal como lo demostró Jones et al en [34].

, (16)

Dónde y es la deformación homogénea relativa al punto material .

# Resultados y discusión

**3.1 Esfuerzos locales estimados con el método Atom-to-continuum (ATC)**

En la Figura 2 se observan los esfuerzos locales para 3 diferentes tamaños de grano de monocristales de Aluminio con fisura de borde y sometidos a tensión uniaxial en la dirección . En el lado izquierdo se observa un mallado grueso para el cristal y en la derecha un refinamiento de la malla de elementos finitos. Para un mayor número de elementos se obtiene una mejor distinción y cálculo de esfuerzos alrededor de la punta de la fisura. Sin embargo, se observan altos esfuerzos, inmediatamente, en los nodos cercanos a las superficies libres de tracción de la fisura; lo que es contrastante con hallazgos previos [10] y de otros investigadores en la literatura para potenciales interatómicos EAM y para materiales con estructura cristalina FCC.

|  |  |
| --- | --- |
| (a)Tamaño de grano 8.1 nm con 400 elementos | (b)Tamaño de grano 8.1 nm con 13950 elementos |
| (c)Tamaño de grano 16.2 nm con 1120 elementos | (d)Tamaño de grano de 16.2 nm con 24000 elementos |
| (e)Tamaño de grano 24.3 nm con 2240 elementos | (f)Tamaño de grano 24.3 nm con 81000 elementos |

**Figura 2**. Campo de esfuerzos locales en monocristales de Aluminio con fisura de borde para diferentes tamaños de grano.

Recientemente, Stepanova et al. [38] evaluaron los campos de esfuerzos en el Cobre (Cu) y el Aluminio (Al) para una placa con fisura central bajo condiciones de carga mixta (modo I y modo II) y observaron una distribución de esfuerzos de acuerdo con la teoría del medio continuo y la mecánica de la fractura lineal elástica en las superficies libres de tracción como el caso de los planos de la fisura. Estas diferencias se pueden atribuir intrínsecamente al método “Atom-to-continuum” (ATC) y su configuración. Como se puede observar, en una malla con pocos elementos los nodos pueden encontrarse en puntos intermedios de la punta de la fisura y el borde, dónde, contrastan esfuerzos locales muy altos y esfuerzos locales muy bajos, es decir, gradientes grandes que requieren una resolución de la malla mucho más fina para una mejor interpolación de los valores nodales. Sin embargo, una malla más fina puede significar que cada nodo dependa de la información de pocos átomos.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| |  |  | | --- | --- | |  |  | |

**Figura 4**. Histograma de esfuerzos locales con esfuerzo promedio y desviación estándar en un monocristal de aluminio de 16.2 nm.

Por esta razón, se separan estas dos escalas de longitud y se usa una función de localización esférica con un radio de 3 veces el parámetro de red. Con esta configuración, es posible obtener una mejor resolución en cada nodo y hacer simultáneamente el refinamiento del mallado como sugiere Jones et al. en [28]. No obstante, observamos que no son bien definidas estas regiones libres de esfuerzos de tracción, aún, implementando las configuraciones anteriormente expuestas. En una investigación similar encontrada en la literatura [39] se pueden observar diferencias del 22.7% en la resistencia última a la tensión del material con fisura central. Adicionalmente, se observa que en DM alcanza el valor máximo a una deformación del 6.9%, mientras, en ATC se alcanza el valor máximo a 2.3% de deformación.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| |  |  | | --- | --- | |  |  | |

**Figura 5**. Histograma de esfuerzos locales con esfuerzo promedio y desviación estándar en un monocristal de aluminio de 24.3 nm.

Para verificar los resultados obtenidos de ATC se calculan los esfuerzos promedios de los tres tamaños de grano con el mayor número de elementos y se comparan con los esfuerzos globales obtenidos de dinámica molecular usando el teorema del Virial y los promedios derivados de la formulación de Hardy [40].

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| |  |  | | --- | --- | |  |  | |

**Figura 3**. Histograma de esfuerzos locales con esfuerzo promedio y desviación estándar en un monocristal de aluminio de 8.1 nm.

**Tabla 1.** Resistencia última a tensión para monocristales de Aluminio con diferentes tamaños de grano.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| d[nm] | VT  GPa | Hardy GPa | ATC GPa | Error\* (%) |
| 8.1 | 2.79 | 2.66 | 6.67 | 150.7 |
| 16.2 | 2.87 | 2.84 | 6.39 | 125.0 |
| 24.3 | 2.68 | 2.56 | 7.90 | 208.5 |

\*Error relativo entre el esfuerzo global calculado con ATC y la formulación de Hardy.

Se verificó la independencia del mallado con el propósito de obtener un valor de convergencia de la resistencia última a la tensión. Para esto se refinó la malla conservando el radio de la función de localización en los diferentes tamaños de grano. En la Figura 6. se puede observar que el valor del esfuerzo global converge a 6.67 GPA para el cristal de 8 nm y el error máximo que se evidencia es de 3.44% con la malla gruesa. Por otro lado, para el cristal de 16 nm el esfuerzo global converge a 6.39 GPA con un error máximo de 9.54 % y el del cristal de 24 nm converge a 7.9 GPa con un error de 11%.

|  |
| --- |
|  |
|  |
|  |

**Figura 6**. Independencia del mallado con el esfuerzo global calculado con ATC.



**Figura 7**. Comparación de la resistencia última a la tensión de monocristal fisurado con el método de Hardy y con ATC para tres tamaños de grano.

## Efecto del tamaño de grano en la resistencia última del cristal fisurado

En la Figura 7 se puede observar que existe una diferencia entre la resistencia última a la tensión calculada con la formulación de Hardy y la calculada con el método “Atom-to-continuum” para los 3 tamaños de granos seleccionados. Sin embargo, se puede ver que tanto para Hardy como ATC la resistencia exhibe independencia al tamaño de grano para los diferentes monocristales con fisura inicial. Hallazgos similares en la independencia de la resistencia del tamaño de grano han sido detallados en otras investigaciones como en [41]. Los autores demostraron que para monocristales de Aluminio perfectos con un tamaño de grano entre 0 a 30 nm su resistencia a la tensión no varía significativamente. En la presente investigación se relaciona que las diferencias con [41] pueden ser ocasionadas principalmente por la presencia de la fisura de borde en los monocristales, el potencial interatómico que causa diferencias significativas en los valores obtenidos tal como lo demuestran en [42] y la velocidad de deformación y la temperatura a la que es desarrollada la simulación tal como lo demuestran en [43]. A pesar de ser el mismo material, existen factores como los anteriormente mencionados que pueden causar diferencias en los valores resultantes. Sin embargo, en esta investigación se observa que las diferencias en los esfuerzos locales y globales del Aluminio hallados con Hardy y con ATC son considerablemente altas. Esto se atribuye a diferencias metodológicas en la concepción del método ATC y las simulaciones en la dinámica molecular. En [34] los autores explican que la creación de fisuras la hacen eliminando las fuerzas interatómicas entre 2 planos de átomos para que bajo la carga de deformación se cree la fisura. Mientras, en la presente investigación no se eliminan estas interacciones entre los átomos. Por el contrario, se elimina un volumen de átomos para crear la fisura de borde inicial antes de emplear cualquier carga sobre el cristal. Además, se observa que las deformaciones aplicadas y postprocesadas con ATC preservan la estructura cristalográfica en los átomos del material y provocan desplazamientos uniformes en los átomos del cristal. Mientras en la presente investigación, las simulaciones de dinámica molecular deforman el cristal sin preservar las condiciones uniformes en el desplazamiento de los átomos.

# Conclusiones

En el presente trabajo, el método multiescala “Atom-to-continuum” fue implementado para calcular esfuerzos locales en monocristales de Aluminio para diferentes tamaños de grano y así estimar el efecto del tamaño de grano en la resistencia última a la tensión. Los resultados fueron comparados con los resultados obtenidos de la formulación de Hardy. Los principales hallazgos de la investigación se pueden resumir a continuación:

* La resistencia última a la tensión exhibe independencia al tamaño de grano para los diferentes monocristales evaluados con fisura de borde.
* Los esfuerzos globales calculados con ATC presentan errores superiores al 100% con respecto a los calculados con la formulación de Hardy.
* El número de elementos afecta el cálculo de esfuerzos locales cerca a la punta de la fisura debido a la interpolación de valores con esfuerzos muy altos y con esfuerzos cero en las zonas libres de tracción.

# Referencias

[1] B. Shiari and R. E. Miller, “Multiscale modeling of crack initiation and propagation at the nanoscale,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 88, pp. 35–49, 2016.

[2] H. Chabba, M. Lemaalem, A. Derouiche, and D. Dafir, “Modeling aluminum using molecular dynamics simulation,” *J. Mater. Environ. Sci.*, vol. 9, no. 1, pp. 93–99, 2018.

[3] S. Subedi, S. M. Handrigan, L. S. Morrissey, and S. Nakhla, “Mechanical properties of nanocrystalline aluminium: a molecular dynamics investigation,” *Mol. Simul.*, vol. 0, no. 0, pp. 898–904, 2020.

[4] B. Tang and R. Yang, “Molecular dynamics study of uniaxial deformation in perfect and defective aluminum,” *Chinese J. Phys.*, vol. 53, no. 7, pp. 1–13, 2015.

[5] W. Velilla-Díaz, L. Ricardo, A. Palencia, and H. R. Zambrano, “Fracture toughness estimation of single-crystal aluminum at nanoscale,” *Nanomaterials*, vol. 11, no. 3, pp. 1–11, 2021.

[6] E. N. Hahn and M. A. Meyers, “Grain-size dependent mechanical behavior of nanocrystalline metals,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 646, pp. 101–134, 2015.

[7] W. Xu and L. P. Dávila, “Tensile nanomechanics and the Hall-Petch effect in nanocrystalline aluminium,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 710, no. October 2017, pp. 413–418, 2018.

[8] C. Suryanarayana, “Nanocrystalline materials c. Suryanarayana,” *Int. Mater. Rev.*, vol. 40, no. 2, pp. 41–64, 1995.

[9] S. Chandra, N. N. Kumar, M. K. Samal, V. M. Chavan, and R. J. Patel, “Molecular dynamics simulations of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 117, pp. 518–526, 2016.

[10] W. Velilla-Díaz, A. Pacheco-Sanjuan, and H. R. Zambrano, “The role of the grain boundary in the fracture toughness of aluminum bicrystal,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 167, no. March, pp. 34–41, 2019.

[11] W. Velilla-Díaz and H. R. Zambrano, “Crack Length Effect on the Fracture Behavior of Single-Crystals and Bi-Crystals of Aluminum,” no. Figure 1, pp. 1–9, 2021.

[12] W. K. Liu, E. G. Karpov, S. Zhang, and H. S. Park, *An introduction to computational nanomechanics and materials*, vol. 193, no. 17–20. 2004.

[13] H. S. Park and W. K. Liu, “An introduction and tutorial on multiple-scale analysis in solids,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 193, no. 17–20, pp. 1733–1772, 2004.

[14] W. A. Curtin and R. E. Miller, “Atomistic / continuum coupling in computational,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 11, p. R33, 2003.

[15] L. E. Shilkrot, R. E. Miller, and W. A. Curtin, “Multiscale plasticity modeling: Coupled atomistics and discrete dislocation mechanics,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 52, no. 4, pp. 755–787, 2004.

[16] R. Miller, E. B. Tadmor, R. Phillips, and M. Ortiz, “Quasicontinuum simulation of fracture at the atomic scale,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 6, no. 5, pp. 607–638, 1998.

[17] C. S. Shin, M. C. Fivel, D. Rodney, R. Phillips, V. B. Shenoy, and L. Dupuy, “Formation and strength of dislocation junctions in FCC metals: A study by dislocation dynamics and atomistic simulations,” *J. Phys. IV JP*, vol. 11, no. 5, 2001.

[18] H. Moslemzadeh, O. Alizadeh, and S. Mohammadi, “Quasicontinuum multiscale modeling of the effect of rough surface on nanoindentation behavior,” *Meccanica*, vol. 54, no. 3, pp. 411–427, 2019.

[19] R. Z. Qiu, Y. C. Lin, and T. H. Fang, “Fatigue crack growth characteristics of Fe and Ni under cyclic loading using a quasi-continuum method,” *Beilstein J. Nanotechnol.*, vol. 9, no. 1, pp. 1000–1014, 2018.

[20] E. Saether, V. Yamakov, and E. H. Glaessgen, “An embedded statistical method for coupling molecular dynamics and finite element analyses,” *Int. J. Numer. Methods Eng.*, no. January, pp. 1292–1319, 2009.

[21] V. I. Yamakov, D. H. Warner, R. J. Zamora, E. Saether, W. A. Curtin, and E. H. Glaessgen, “Investigation of crack tip dislocation emission in aluminum using multiscale molecular dynamics simulation and continuum modeling,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 65, no. 1, pp. 35–53, 2014.

[22] Y. Chen, S. Shabanov, and D. L. McDowell, “Concurrent atomistic-continuum modeling of crystalline materials,” *J. Appl. Phys.*, vol. 126, no. 10, 2019.

[23] S. Yang and Y. Chen, “Concurrent atomistic and continuum simulation of bi-crystal strontium titanate with tilt grain boundary,” *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 471, no. 2175, 2015.

[24] R. J. Hardy, “Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: Shock waves,” *J. Chem. Phys.*, vol. 76, no. 1, pp. 622–628, 1982.

[25] M. I. Mendelev, M. J. Kramer, C. A. Becker, and M. Asta, “Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu,” *Philos. Mag.*, vol. 88, no. 12, pp. 1723–1750, 2008.

[26] S. J. Plimpton, “Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics,” *J. Comput. Phys.*, vol. 117, pp. 1–19, 1995.

[27] A. P. Thompson, S. J. Plimpton, and W. Mattson, “General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions,” *J. Chem. Phys.*, vol. 131, no. 15, 2009.

[28] R. E. . Jones, J. Templeton, and J. Zimmerman, “Principles of Coarse-Graining and Coupling Using the Atom-to-Continuum Method,” in *Springer Series in Materials Science*, vol. 245, 2016, pp. 441–468.

[29] J. A. Templeton, R. E. Jones, and G. J. Wagner, “Application of a field-based method to spatially varying thermal transport problems in molecular dynamics,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 18, no. 8, 2010.

[30] R. E. Jones, J. A. Templeton, and T. W. Rebold, “Simulated real-time detection of a small molecule on a carbon nanotube cantilever,” *J. Comput. Theor. Nanosci.*, vol. 8, no. 8, pp. 1364–1384, 2011.

[31] J. A. Zimmerman, E. B. Webb, J. J. Hoyt, R. E. Jones, P. A. Klein, and D. J. Bammann, “Calculation of stress in atomistic simulation,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 12, no. 4, 2004.

[32] R. E. Jones and J. A. Zimmerman, “The construction and application of an atomistic J-integral via Hardy estimates of continuum fields,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 58, no. 9, pp. 1318–1337, 2010.

[33] J. A. Zimmerman, R. E. Jones, and J. A. Templeton, “A material frame approach for evaluating continuum variables in atomistic simulations,” *J. Comput. Phys.*, vol. 229, no. 6, pp. 2364–2389, 2010.

[34] R. E. Jones, J. A. Zimmerman, J. Oswald, and T. Belytschko, “An atomistic J-integral at finite temperature based on hardy estimates of continuum fields,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 23, no. 1, 2011.

[35] J. A. Zimmerman and R. E. Jones, “The application of an atomistic J-integral to a ductile crack,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 25, no. 15, 2013.

[36] G. J. Wagner, R. E. Jones, J. A. Templeton, and M. L. Parks, “An atomistic-to-continuum coupling method for heat transfer in solids,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 197, no. 41–42, pp. 3351–3365, 2008.

[37] T. J. R. Hughes, *The Finite Element Method Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. New Jersey, 1978.

[38] L. Stepanova and S. Bronnikov, “A computational study of the mixed–mode crack behavior by molecular dynamics method and the multi – Parameter crack field description of classical fracture mechanics,” *Theor. Appl. Fract. Mech.*, vol. 109, no. June, p. 102691, 2020.

[39] T. Guan, Y. Sun, Z. Yang, Y. Jing, and W. Guo, “Multi-scale simulations of fracture behavior in CeO2,” *Ceram. Int.*, vol. 46, no. 18, pp. 28613–28620, 2020.

[40] W. Velilla Diaz, “Efecto de las fronteras de grano en la tenacidad a la fractura de materiales nano-cristalinos fisurados,” Universidad del Norte, Barranquilla,Colombia, 2019.

[41] W. Xu and L. P. Dávila, “Size dependence of elastic mechanical properties of nanocrystalline aluminum,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 692, no. March, pp. 90–94, 2017.

[42] L. S. Morrissey and S. Nakhla, “Considerations when calculating the mechanical properties of single crystals and bulk polycrystals from molecular dynamics simulations,” *Mol. Simul.*, vol. 0, no. 0, pp. 1–10, 2020.

[43] L. Yuan, D. Shan, and B. Guo, “Molecular dynamics simulation of tensile deformation of nano-single crystal aluminum,” *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 184, no. 1–3, pp. 1–5, 2007.